白铭复 编著

物理学中的群论方法

下册

WULI XUEZHONGDE QUNLUNFANGFA

国防科技大学出版社

装帧设计 侯 云

物理学中的群论方法

统一书号：15415·017
ISBN 7—81024—001—3

O·1 定价：3.30元

物理学中的群论方法

·下　册·

白铭复　编著

国防科技大学出版社

内 容 介 绍

本书系统地讲述群论及群表示论的基本内容；着重讨论了有限群的表示，李群李代数的基本理论，半单李群李代数的分类和表示问题，群论与量子力学的关系，以及运用群论原理处理物理学中的对称性问题的一般方法。对于物理学中的常见群，如分子点群、晶体点群、空间群、旋转群、洛仑兹群、幺正群等都作了详细的描述，对它们的结构和表示给出了简洁而严谨的论证与推演。

本书在陈述方式、证明补充和材料组织等方面兼顾了数学的严谨性与便于具有相当于大学物理专业高年级学生的数理基础的非数学专业读者阅读两个方面的要求；在取材方面，同时照顾了分子原子物理、固体物理、核物理、粒子物理等专业的读者对群论知识的共同的和特殊的需要。

全书分上、下册出版。上册包括对物理学中常见群的描述与推导，群论和群表示论基础，有限群的表示理论。下册包括李群李代数的表示理论，置换群的表示，空间群的表示，群论与量子力学的关系（和应用）。书末附有各习题。

本书可作为高等学校物理和化学方面有关专业的高年级本科生以及研究生的群论教材或参考书，也可供物理、化学、数学工作者或教师参考。

物理学中的群论方法

下 册

白铭复 编著

责任编辑 马立群

封面设计 侯 云

国防科技大学出版社 出版

湖 南 省 新 华 书 店 发 行

国 防 科 技 大 学 印 刷 厂 印 装

开本：787×1092 1/32　印张：16 3/16　字数：386千字

1986年12月第1版　1986年12月第1次印刷　印数：0,001—3,000册

统一书号：15415·017

ISBN 7—81024—001—3

O·1　定价：3.30元

说　　明

本书全书的参考书目已集中附于上册的末尾，因而下册不再列出。

为了使读者更好地理解书中各章的内容和便于进行自我检验，我们编写和精选了适量的习题，集中附于下册末尾。其中少数题目是对正文内容的扩充和引伸，可当作进行某些专题研究的导引；在将本书作为教材使用时，可选用难度适当的题目留给学生练习。

况蕙孙教授对于本册的撰写提出了重要的建设性意见，并审阅了全书。在此谨向况蕙孙教授致以诚挚的谢意。

作　者

1986年 9 月

目　　录

第五章　李群的表示

第六章 群论与量子力学

第八章 空间群的表示

习 题

第五章　李群的表示

在8.2小节中已经介绍了连续群的概念，其特点是可以参数化，而群内的乘法和逆元运算在这种参数下是用连续函数来表示的。如果这些函数不但连续而且还是可微（严格讲，是三次可微[15]）的，则这种群又称为李群。已经证明，一个群如能被连续的参数化，则也能被可微的参数化（这就是所谓希尔伯特"第五问题）"。因此，我们这里不必区分连续群和李群，而可以直接利用参数（乘法函数）的可微性。

本章将从被研究得很充分的旋转群开始，阐述李群的表示理论。在物理学中重要的是李群的局部结构和表示，因而在李群及其表示的一般性讨论中我们将限于其局部性质而不涉及整体性质。为了降低表述的抽象性，讨论将针对线性李群进行。由于每个局部李群都同构于一个局部线性李群，这样做本质上并没有牺牲普遍性。李群的局部性质是由其无穷小生成元（或无穷小算子）的代数结构——李代数决定的，这样李代数便自然成为研究李群的局部性质和表示论的重要工具。我们将用李代数方法来表述半单纯群的分类和表示论的主要结果，并按照G·拉卡(Giulio Racah)在为物理学家所作的精緻的总结中所采取的思路。最后，关于群$SU(3)$、$SO(4)$和$SO(3,1)$的表示将做为解释一般理论的例子给出。

§21　SO(3)与SU(2)的不可约表示

21.1　$SO(3)$和$SU(2)$的生成元与局部表示

在§4和§7中已经表明，这两个群的无穷小生成元满足同样

的对易关系（(4.14)和(7.15)），因而在单位元的邻域有相同的乘法函数（见式(4.15)），是局部同构的。它们的局部表示也是相同的，可以统一考虑。为确定起见，象在§4和§7中一样，我们仍将参数取为转动矢量$\boldsymbol{\alpha}$。

设$\hat{A}(\boldsymbol{\alpha})$是$SO(3)$的任一(可微的)表示，则重复对(4.9)式的推导过程可得

$$\hat{A}(\boldsymbol{\alpha})=e^{\hat{A}_1\alpha_1+\hat{A}_2\alpha_2+\hat{A}_3\alpha_3} \tag{21.1}$$

其中

$$\hat{A}_i=\left.\frac{\partial\hat{A}}{\partial\alpha_i}\right|_{\alpha=0} \tag{21.2}$$

而同态关系要求(4.15)中的I_i换成$\hat{A}_i$后仍然成立，再对照公式(4.12)，这必须有

$$[\hat{A}_i,\hat{A}_j]=\sum_k\varepsilon_{ijk}\hat{A}_k \tag{21.3}$$

即$\hat{A}_i$满足的对易关系与I_i的相同。反之，如果有任一满足(21.1)和(21.3)式的可微算子函数$\hat{A}(\boldsymbol{\alpha})$，则有乘法规则

$$e^{\sum_i\hat{A}_i\alpha_i}e^{\sum_j\hat{A}_j\beta_j}=e^{\sum_k\hat{A}_k\left(\alpha_k+\beta_k+\frac{1}{2}\sum\varepsilon_{ijk}\alpha_i\beta_j+\cdots\right)}$$

对照(4.15)便可看出，映射

$$g(\boldsymbol{\alpha})\longrightarrow\hat{A}(\boldsymbol{\alpha})$$

是同态的。即$\hat{A}(\boldsymbol{\alpha})$是群的一个表示。总之，$\hat{A}(\boldsymbol{\alpha})$为$SO(3)$之表示的充要条件是满足(21.1)和(21.3)。

表示空间在$\hat{A}(\boldsymbol{\alpha})$（$\boldsymbol{\alpha}$跑遍零的某一邻域）下不变的充要条件是它在$\{\hat{A}_1,\hat{A}_2,\hat{A}_3\}$下不变(由(21.1))。由此可知：表示$\hat{A}(\boldsymbol{\alpha})$不可约的充要条件是表示的空间在$\{\hat{A}_1,\hat{A}_2,\hat{A}_3\}$下是不可约的（没有在三个$\hat{A}_i$下不变的真子空间）。用矩阵的语言来说，就是：矩阵组$\{A_1,A_2,A_3\}$不可约（不能由同一矩阵经相似变换化为同样的对角块型）。

以上分析表明，为了得到$SO(3)(SU(2))$的全部不可约表示（局部），只须求出满足对易关系(21.3)的所有不可约算子（矩阵）组$\{\hat{A}_1,\hat{A}_2,\hat{A}_3\}$。这些不可约算子（矩阵）组通过(21.1)式确定群的全部不可约表示，而两者的表示空间是相同的。这就使寻求群的不可表示的完全集问题得到很明显的简化。

21.2 $SO(3)$和$SU(2)$的局部表示的推导

为了便于推演，先对算子组$\{\hat{A}_1,\hat{A}_2,\hat{A}_3\}$作一些变换。可将$\hat{A}_l$先换成自厄算子$\hat{J}_l$（角动量）

$$\hat{J}_l=i\hat{A}_l \tag{21.4}$$

要求待定的表示为幺正的（对紧致群总可以这样），由

$$\hat{A}(\alpha)=e^{-i(\hat{J}_1\alpha_1+\hat{J}_2\alpha_2+\hat{J}_3\alpha_3)}=e^{-i\hat{J}\cdot\alpha} \tag{21.5}$$

可见，$\hat{A}^+=\hat{A}^{-1}$要求$\hat{J}_i$是自厄的，即

$$\hat{J}_i^+=\hat{J}_i \tag{21.6}$$

由(21.3)和(21.4)式，$\hat{J}_i$的对易式应为

$$[\hat{J}_l,\hat{J}_j]=i\sum_k\varepsilon_{ljk}\hat{J}_k \tag{21.7}$$

或 $$\hat{\boldsymbol{J}}\times\hat{\boldsymbol{J}}=i\hat{\boldsymbol{J}}$$

再令

$$\begin{cases}\hat{J}_+=\hat{J}_1+i\hat{J}_2\\ \hat{J}_-=\hat{J}_1-i\hat{J}_2\end{cases} \tag{21.8}$$

则由(21.7)式又可求得三个新算子$\hat{J}_+$、$\hat{J}_-$、$\hat{J}_3$的对易式

$$[\hat{J}_3,\hat{J}_+]=\hat{J}_+ \tag{21.9}$$

$$[\hat{J}_3,\hat{J}_-]=-\hat{J}_- \tag{21.10}$$

$$[\hat{J}_+,\hat{J}_-]=2\hat{J}_3 \tag{21.11}$$

且有

$$\hat{J}_+^+=\hat{J}_-,\quad \hat{J}_3^+=\hat{J}_3 \tag{21.12}$$

注意由$\{\hat{A}_1,\hat{A}_2,\hat{A}_3\}$到$\{\hat{J}_+,\hat{J}_-,\hat{J}_3\}$的变换是一一的线性变换，

两者具有共同的不变子空间，所以它们同时是可约的或不可约的。因而求群的不可约幺正表示的问题，现在可转化为求具有性质(21.9)、(21.10)、(21.11)和(21.12)的不可约算子组$\{\hat{J}_+,\hat{J}_-,\hat{J}_3\}$的问题。

设$\mathscr{V}$是任意一个在$\{\hat{J}_+,\hat{J}_-,\hat{J}_3\}$下不变的不可约空间，我们来推导这组算子的可能（矩阵）形式。

首先$\hat{J}_3$必有（实）本征值，设其最大本征值为J，在$\mathscr{V}$内取属于这个本征值的一个本征矢，记为ψ_J。再由ψ_J出发在$\mathscr{V}$内取矢量叙列。

$$\psi_J,\ \psi_{J-1}=\hat{J}_-\psi_J,\ \psi_{J-2}=\hat{J}_-\psi_{J-1},\ \cdots,\ \psi_{J-x}=\hat{J}_-\psi_{J-x+1} \tag{21.13}$$

这样定义的矢量每个都是算子$\hat{J}_3$的本征矢，而且所属的本征值分别为J，$J-1$，$J-2$，…。因为由(21.10)式知，如果$\hat{J}_3\psi=M\psi$，则必有$\hat{J}_3(\hat{J}_-\psi)=(M-1)(\hat{J}_-\psi)$，即$\hat{J}_-$将$\hat{J}_3$的本征矢然变为$\hat{J}_3$的本征矢，但所对应的本征值降1(除非$\hat{J}_3$的本征矢被变为零）。又，$\mathscr{V}$的维数有限，叙列(21.13)必有限，其中$(J-x)$为$\hat{J}_3$的最小本征值，则有

$$\hat{J}_-\psi_{J-x}=0 \tag{21.14}$$

叙列(21.13)所张成的子空间在$\hat{J}_3$和$\hat{J}_-$的作用下显然是不变的，不难证明，它在$\hat{J}_+$的作用下也是不变的。因为由(21.9)可知，$\hat{J}_+$将$\hat{J}_3$的本征矢仍变为$\hat{J}_3$的本征矢（除非变为零），但所属的本征值增1，所以这个子空间在三个算子$\{\hat{J}_+,\hat{J}_-,\hat{J}_3\}$下不变。但按不可约的假设，$\mathscr{V}$没有在这组算子作用下不变的真子空间，故叙列(21.13)张成整个$\mathscr{V}$空间，并形成$\mathscr{V}$的一组正交基。反复利用对易式(21.11)，可得出$\hat{J}_+$作用于该基矢叙列的结果

$$\hat{J}_+\psi_J=0,\ \hat{J}_+\psi_{J-1}=2J\psi_J,\ \hat{J}_+\psi_{J-2}=2(2J-1)\psi_{J-1},\ \cdots,\hat{J}_+\psi_{J-x}=x(2J-x+1)\psi_{J-x+1} \tag{21.15}$$

再将(21.11)作用于ψ_{J-x}，并注意(2.14)，可得

$$-x(2J-x+1)=2(J-x)$$

解出

$$x=2J \tag{21.16}$$

可见，基矢中的最后一个矢量是ψ_{-J}。不可约空间$\mathscr{V}$的维数为

$$n_J=2J+1 \tag{21.17}$$

至此，我们已经可以由(21.13)—(21.17)诸式写出不可约矩阵组$\{J_+,J_-,J_3\}$的所有可能的维数和形状了。

为了得到矩阵$\{J_+,J_-,J_3\}$的标准形式，需将$\mathscr{V}$的基矢(21.13)归一化。如取ψ_J是归一的

$$\langle\psi_J|\psi_J\rangle=1$$

则由(21.13)、(21.12)、(21.11)和(21.15)式有

$$\langle\psi_{J-1}|\psi_{J-1}\rangle=\langle\psi_J|\hat{J}_+\hat{J}_-|\psi_J\rangle=2J$$

$$\langle\psi_{J-2}|\psi_{J-2}\rangle=\langle\psi_{J-1}|\hat{J}_+\hat{J}_-|\psi_{J-1}\rangle=2J\times 2(2J-1)$$

$$\cdots\cdots\cdots$$

$$\langle\psi_{J-N}|\psi_{J-N}\rangle=\prod_{x=1}^{N}x(2J-x+1)=\frac{N!\,(2J)!}{(2J-N)!}$$

或统一写为

$$\begin{cases}\langle\psi_M|\psi_M\rangle=(2J)!\,\dfrac{(J-M)!}{(J+M)!}\\ M=J,\ J-1,\ \cdots,\ -J\end{cases} \tag{21.18}$$

可见归一化基应取为

$$\begin{cases}\varphi_M=\left[(2J)!\,\dfrac{(J-M)!}{(J+M)!}\right]^{-\frac{1}{2}}\psi_M\\ M=J,\ J-1,\ \cdots,\ -J\end{cases} \tag{21.19}$$

J算子在标准基(21.19)下的形式为

$$
\left\{
\begin{aligned}
\hat{J}_+\varphi_M &\doteq \sqrt{(J-M)(J+M+1)}\,\varphi_{M+1} \\
&= \sqrt{J(J+1)-M(M+1)}\,\varphi_{M+1} \\
\hat{J}_-\varphi_M &= \sqrt{(J+M)(J-M+1)}\,\varphi_{M-1} \\
&= \sqrt{J(J+1)-M(M-1)}\,\varphi_{M-1} \\
\hat{J}_3\varphi_M &= M\varphi_M
\end{aligned}
\right.
\qquad (21.20)
$$

或写为矩阵形式

$$
J_+ = \begin{pmatrix}
0 & \sqrt{2J} & 0 & 0 \cdots 0 \\
 & 0 & \sqrt{2(2J-1)} & 0 \cdots 0 \\
 & & \ddots & \\
 & & & 0 \cdots \sqrt{2J} \\
0 & & & 0
\end{pmatrix}
$$

$$
J_- = \begin{pmatrix}
0 & & & & 0 \\
\sqrt{2J} & 0 & & & \\
0 & \sqrt{2(2J-1)} & 0 & & \\
 & & & \ddots & \\
0 & \cdots & 0 & \sqrt{2J} & 0
\end{pmatrix}
$$

$$
J_3 = \begin{pmatrix}
J & & & & 0 \\
 & J-1 & & & \\
 & & J-2 & & \\
 & & & \ddots & \\
0 & & & & -J
\end{pmatrix}
\qquad (21.21)
$$

由于开始只假定$\mathscr{V}$是任意不可约表示空间，因而我们已经没有遗漏地得到了全部不可约表示。每个不可约表示可用$\hat{J}_3$的最大本征值J来标记，由(21.17)式，J的可取值为

$$
J = 0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ \cdots \qquad (21.22)
$$

以 J 为标记的表示其维数为 $n_J=2J+1$，而其矩阵由(21.20)或(21.21)给出。

21.3 将局部表示延拓为整体表示

把(21.21)式代入(21.5)，便得 $SO(3)$和 $SU(2)$的以 J 为标记的不可约（局部）表示矩阵$D^{(J)}(\boldsymbol{\alpha})$

$$
\begin{cases}
D^{(J)}(\boldsymbol{\alpha})=e^{-i(J_1\alpha_1+J_2\alpha_2+J_3\alpha_3)} \\
J_1=\dfrac{1}{2}(J_++J_-),\quad J_2=\dfrac{1}{2i}(J_+-J_-)
\end{cases}
\tag{21.23}
$$

把(21.23)说成是群的局部表示，是因为按定义要求，作为群的同态象，$D^{(J)}(\alpha)$ 须是单值的，而这一点只有在单位元的邻域内才能确保。进一步将α的取值范围由零点的邻域向整个参数流形进行延拓。这时，$SO(3)$和$SU(2)$的情形是不同的。粗略地说，由于$SO(3)$是复（双）连通的，其中的一类闭合曲线（例如参数球的直径）不能经连续变形收缩到一点（见 8.2 小节例 2）。当令α沿这类闭路跑一周时，尽管对 α 的每个微小变动(21.23)中的$D^{(J)}(\boldsymbol{\alpha})$显然都是连续而光滑地单值变化的，但$\boldsymbol{\alpha}$回到原点时$D^{(J)}(\boldsymbol{\alpha})$却可能达到一个新的值。而$SU(2)$是单连通的(§7)，其中的任一闭路都能在其中连续地收缩到一点。当 $\boldsymbol{\alpha}$沿这种闭路跑一周时，若 $D^{(J)}(\boldsymbol{\alpha})$的值产生一有限改变，让该闭路连续向起（终）点收缩，最后将得出α 的无穷小变动会引起 $D^{(J)}$的有限改变的错误结论。总之，由于$SU(2)$ 是单连通的，将(21.23)作为它的整体表示时必是单值的，因而(21.23)也是$SU(2)$的整体不可约表示。由于 $SO(3)$ 是双连通的，将式(21.23)作为它的整体表示时，有些可能是双值的(因只有两类不能经连续变形相互重合的共端点曲线，不可能出现三值的情况），因而只有单值的那些才是$SO(3)$的整体不可约表示。

上面的讨论是有普遍性的。一般地说，将 k 连通的李群的

局部表示解析地延拓到整个群上去时，可能出现 k 值的情形。在此可以把表示的概念稍为扩充一下，把多值的情形称为群的多值表示（按原定义只能是单值的）。这样在$SO(3)$的双值表示的应用中可以看到，多值表示与单值表示同样有用。在$SO(3)$和$SU(2)$的讨论中已经看到，局部同构的群可以有不同的整体拓扑性质（如连通性）；因而李群的整体表示不能由局部表示完全决定，除非这群是单连通的。对于任意多连通的李群G，总存在一个与它局部同构的单连通李群 $\tilde{G}$，$\tilde{G}$ 称为G的通用覆盖群。$\tilde{G}$ 与G有相同的局部表示，当这些局部表示对 $\tilde{G}$延拓为整体表示时即得$\tilde{G}$ 的单值表示；而把它们作为G的整体表示时，则可能是多值的。因而可以通过作出$\tilde{G}$ 的所有（整体）不可约表示(都是单值的)来获得G的全部单值或多值的（整体）不可约表示。

现在具体地研究一下作为整体表示的(21.23)的单值性问题。为此，可将$D^{(J)}(\boldsymbol{\alpha})$写为

$$D^{(J)}(\boldsymbol{\alpha})=D^{(J)}(\boldsymbol{\beta})D^{(J)}(0,0,\alpha)D^{(J)}(-\boldsymbol{\beta}) \quad (21.24)$$

其中 $\boldsymbol{\beta}$ 是将 z 轴转到 $\boldsymbol{\alpha}$ 方向的转动矢量（见式(2.27)），由(21.23)和(21.21)有

$$D^{(J)}(0,0,\alpha)=e^{-iJ_3\alpha}=\begin{pmatrix} e^{-iJ\alpha} & & & 0 \\ & e^{-i(J-1)\alpha} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & e^{iJ\alpha} \end{pmatrix} \quad (21.25)$$

对于$SU(2)$来说，α和$(\alpha+4\pi)$代表同一元素（注意，这是唯一可能产生多值问题的因素，因为 $D^{(J)}$作为α的函数表达式本来是单值的），而上式表明，当J为整数或半奇数时，都有

$$D^{(J)}(0,0,\alpha)=D^{(J)}(0,0,\alpha+4\pi) \quad (21.26)$$

所以，所有的 $D^{(J)}(\alpha)$都是 $SU(2)$的单值表示。对 $SO(3)$来说，α和$(\alpha+2\pi)$代表同一元素(§4)，由(21.25)，有

$$D^{(J)}(0,0,\alpha+2\pi)=\begin{cases}D^{(J)}(0,0,\alpha), & \text{当}J=\text{整数}\\ -D^{(J)}(0,0,\alpha), & \text{当}J=\text{半奇数}\end{cases} \tag{21.27}$$

可见 J 为整数的$D^{(J)}(\alpha)$是 $SO(3)$的单值表示，J 为半奇数的 $D^{(J)}(\alpha)$是$SO(3)$的双值表示($\pm D^{(J)}(\alpha)$对应于$SO(3)$的同一元)。

21.4 $SO(3)$与$SU(2)$的单纯特征标

由(21.24)和(21.25)易得

$$\chi^{(J)}(\alpha)=\mathrm{tr}D^{(J)}(\alpha)=\mathrm{tr}D^{(J)}(0,0,\alpha)=\sum_{M=-J}^{J}e^{-iM\alpha}$$

可见特征标只是 $\alpha=|\boldsymbol{\alpha}|=\sqrt{\alpha_1^2+\alpha_2^2+\alpha_3^2}$ 的函数。这是因为特征标是类函数，而在$SO(3)$和$SU(2)$中所有转角值相同的元属于同一类。上面的结果可以写为

$$\chi^{(J)}(\alpha)=\sum_{M=-J}^{J}e^{-iM\alpha}=\frac{\sin\left[\left(J+\frac{1}{2}\right)\alpha\right]}{\sin\left(\frac{1}{2}\alpha\right)} \tag{21.28}$$

对于$SO(3)$，$0\leqslant\alpha\leqslant\pi$；对于$SU(2)$，$0\leqslant\alpha\leqslant2\pi$。

§17和§18中关于特征标的理论，是针对有限群讨论的，但除了那些当群的阶变为无穷时就失去意义的命题（如关于不可约表示的个数和维数的定理）之外，大部分内容都可以推广到紧致的连续群上去。这可以从概念的定义和理论的论证中看出：有些并不涉及群是有限还是无限，有些则依赖于群上不变和的存在（如正交性定理），而这对于有限群和紧致的连续群是同样满足的。为了把对有限群的表述改为对紧致连续群的表述，只须在符号上作如下代换

$$\sum_{g\in G}\longrightarrow\int_G dg$$

例如群阶$N(G)$⟶群体积$V(G)$。$SO(3)$和$SU(2)$都是紧致的，因而上述情况对它们也适用。例如，特征标的正交性可写为

$$(\chi^{(J)},\chi^{(J')})=\int_G dg\chi^{(J)}(g)\chi^{(J')*}(g)=V(G)\cdot\delta_{JJ'} \tag{21.29}$$

其中

$$V(G)=\begin{cases}8\pi^2, & G=SO(3)\\ 16\pi^2, & G=SU(2)\end{cases} \tag{21.30}$$

用(21.28)式可直接验证(21.29)。为此，需写出群体积元在(θ,φ,α)坐标系下的表达式，其中θ和φ是$\boldsymbol{\alpha}$的方位角的球坐标，$\alpha=|\boldsymbol{\alpha}|$。显然有（参看§4）

$$g(\theta,\varphi,\alpha)=e^{I_3\varphi}e^{I_2\theta}e^{I_3\alpha}e^{-I_2\theta}e^{-I_3\varphi} \tag{21.31}$$

仿照4.5小节中对(4.22)式的推导方法，并注意只保留坐标微分的一次项，最后为了使新老测度一致（即群体积相同）应取待定因子$\sqrt{I}=1$，可得

$$\begin{aligned}dg&=2\sin\theta(1-\cos\alpha)d\theta d\varphi d\alpha\\&=4\sin\theta\sin^2\frac{\alpha}{2}d\theta d\varphi d\alpha\end{aligned} \tag{21.32}$$

这便是群体积元在以转动矢量$\boldsymbol{\alpha}$的球坐标为参数时的形式；而(4.22)则是它以欧拉角为参数时的形式。将(21.32)代入(21.29)，并先把对(θ,φ)的积分算出，可得

$$\begin{cases}(\chi^{(J)},\chi^{(J')})=\int\chi^{(J)}(\alpha)\chi^{(J')*}(\alpha)\rho(\alpha)d\alpha\\ \rho(\alpha)=16\pi\sin^2\dfrac{\alpha}{2}\end{cases} \tag{21.23}$$

其中对 α 的积分限，对$SO(3)$取$(0,\pi)$，对$SU(2)$取$(0,2\pi)$。将(21.28)代入上式得

$$(\chi^{(J)},\chi^{(J')})=8\pi\cdot\int_0^{\pi,2\pi}\{\cos[(J-J')\alpha]-\cos[(J+J'+1)\alpha]\}d\alpha$$

由此可见，对于 $SU(2)$，不论 J 为整数或半奇数，正交性关系(21.29)都成立；而对$SO(3)$，(21.29)只对整数的 J 成立。这一点并不与一般理论的结论抵触：一般理论中所说的表示都必须是单值的，在群的不可约表示或单纯特征标的完全集中不包含“多值表示”。因而在严格的意义下，$SO(3)$的不可约表示的完全集是

$$D^{(0)},D^{(1)},D^{(2)},D^{(3)},\cdots$$

而$SU(2)$的不可约表示的完全集为

$$D^{(0)},D^{(\frac{1}{2})},D^{(1)},D^{(\frac{3}{2})},D^{(2)},\cdots$$

事实上，由(21.28)有

$$\chi^{(J)}(\alpha)-\chi^{(J-1)}(\alpha)=2\cos J\alpha$$

又，集$\{\cos J\alpha\colon J=0,1,2,\cdots\}$在以$2\pi$为周期的偶函数类中是完备的，所以 $SO(3)$的任意类函数 $\chi(\alpha)(\alpha\in[0,\pi])$都可展开为$\{\chi^{(J)}(\alpha);\ J=0,1,2,\cdots\}$ 的线性组合；而集$\left\{\cos J\alpha;\ J=0,\frac{1}{2},1,\cdots\right\}$在以 4π 为周期的偶函数类中完备，所以$SU(2)$的任意类函数$\chi(\alpha)(\alpha\in[0,2\pi])$可展为函数系$\left\{\chi^{(J)}(\alpha);\ J=0,\frac{1}{2},1,\cdots\right\}$的线性组合。这就是单纯特征标的完全集的完备性。

21.5 $SO(3)$与$SU(2)$的不可约表示矩阵

由(21.23)很难写出 $D^{(J)}$ 的阵元作为参数的显式函数。当

以欧拉角(φ,θ,ψ)为群参数时，注意到转动$g(\varphi,\theta,\psi)$可由三个转动$e^{I_3\psi}$、$e^{I_2\theta}$、$e^{I_3\varphi}$生成，又可写

$$D^{(J)}(\varphi,\theta,\psi)=e^{-iJ_3\varphi}e^{-iJ_2\theta}e^{-iJ_3\psi} \tag{21.34}$$

由于J_3是对角矩阵，上式中第一、三两个指数因子的阵元容易写出，但$e^{-iJ_2\theta}$（无穷级数）的阵元（用θ的初等函数表示）仍难写出。总之，具有指数形式的(21.23)和(21.34)都不便于导出表示$D^{(J)}$的阵元的具体形式。所以下面我们将沿另一途径来解决这个问题。

考虑变量(x, y)的复值函数所形成的线性空间。两个特殊的函数x和y显然是线性独立的，它们张成一个二维空间，并以$\{x, y\}$为一组基。容易看出$(2J+1)$个函数$\{v_M=x^{J+M}y^{J-M}/\sqrt{(J+M)!\,(J-M)!}：M=J, J-1,\cdots,-J\}$是线性独立的，它们张成一个$(2J+1)$维的空间，现在将$SU(2)$的元(7.1)看作是上述二维空间的变换矩阵

$$(x',y')=(x,y)\begin{pmatrix}\beta & \gamma\\ -\gamma^* & \beta^*\end{pmatrix} \tag{21.35}$$

或

$$\begin{cases}x\longrightarrow x'=\beta x-\gamma^* y\\ y\longrightarrow y'=\gamma x+\beta^* y\end{cases} \tag{21.36}$$

每一个这样的变换将在上述$(2J+1)$维空间中导出一个相应的变换

$$v_M\longrightarrow v'_M=\frac{(\beta x-\gamma^* y)^{J+M}(\gamma x+\beta^* y)^{J-M}}{\sqrt{(J+M)!\,(J-M)!}}$$

$$=\sum_{M'=-J}^{J}D^{(J)}_{M'M}(\beta,\gamma)v_{M'}. \tag{21.37}$$

或写为矩阵形式

$$(v'_J, v'_{J-1}, \cdots, v'_{-J}) = (v_J, v_{J-1}, \cdots, v_{-J}) D^{(J)}(\beta, \gamma) \tag{21.38}$$

阵元 $D^{(J)}_{M'M}(\beta,\gamma)$ 可由对(21.37)中的幂函数作二项式展开求得

$$D^{(J)}_{M'M}(\beta,\gamma) = \sum_l \frac{[(J+M)!(J-M)!(J+M')!(J-M')!]^{\frac{1}{2}}}{(J-M-l)!(J+M'-l)!(M-M'+l)!l!} \cdot \beta^{J+M'-l}\beta^{*J-M-l}(-\gamma^*)^{M-M'+l}\gamma^l \tag{21.39}$$

其中已约定，当$n<0$时，$n! =\infty$，因而和式中的求和指标 l 可由 $-\infty$到∞，而不会出现负数阶乘的项。这样我们就作出了$SU(2)$的$(2J+1)$维表示的矩阵$D^{(J)}(\beta,\gamma)$。

必须进一步考查上面所得的表示是否就是在21.2小节中所得到的不可约表示。为了与前面的结果比较，仍取转动矢量 $\boldsymbol{\alpha}$ 为 $SU(2)$的参数。由于单连通群 $SU(2)$ 的（整体）表示完全由局部表示决定，这个比较可以在 $\alpha=0$ 的某邻域（局部）内进行，例如可取 α 充分小而只保留其一次项。这时由 (7.1)、(7.3)、(7.6)和(7.9)可写出

$$\beta = 1 - i\frac{\alpha_3}{2}, \quad \gamma = -\frac{\alpha_2}{2} - i\frac{\alpha_1}{2}$$

代入(21.39)式仍只保留 α_i 的一次项，得

$$\begin{aligned} D^{(J)}_{M'M}(\boldsymbol{\alpha}) &= \delta_{M'M}(1 - iM\alpha_3) \\ &+ \delta_{M',M-1} \cdot \sqrt{(J+M)(J-M+1)}\left(\frac{\alpha_2}{2} - i\frac{\alpha_1}{2}\right) \\ &+ \delta_{M',M+1} \cdot \sqrt{(J-M)(J+M+1)}\left(-\frac{\alpha_2}{2} - i\frac{\alpha_1}{2}\right) \end{aligned}$$

对比(21.21)，上式又可写为

$$\begin{aligned} D^{(J)}(\boldsymbol{\alpha}) &= I - iJ_3\alpha_3 + J_-\left(\frac{\alpha_2}{2} - i\frac{\alpha_1}{2}\right) + J_+\left(-\frac{\alpha_2}{2} - i\frac{\alpha_1}{2}\right) \\ &= I - i(J_1\alpha_1 + J_2\alpha_2 + J_3\alpha_3) \end{aligned}$$

这正是(21.23)在 $\alpha=0$ 的邻域($\alpha\leqslant1$)内的形式。这就证明了(21.39)式就是 $SU(2)$的以 J 为标记的不可约表示。所以，(21.39)已给出了 $SU(2)$的不可约表示的完全集。

对 $SU(2)(SO(3))$的参数的选取，已经提过的有三种，$SU(2)$的 u 矩阵的元素 β 和 γ 可用任一种参数来表示，代入(21.39)式便得到不可约表示的矩阵元作为群参数的函数。如取转动矢量 α 的直角坐标 $(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)$ 为参数，则由(7.3)和(7.6)有

$$\begin{cases}\beta=\cos\left(\dfrac{1}{2}\sqrt{\alpha_1^2+\alpha_2^2+\alpha_3^2}\right)-i\sin\left(\dfrac{1}{2}\sqrt{\alpha_1^2+\alpha_2^2+\alpha_3^2}\right)\\ \qquad\cdot\dfrac{\alpha_3}{\sqrt{\alpha_1^2+\alpha_2^2+\alpha_3^2}}\\ \gamma=-\sin\left(\dfrac{1}{2}\sqrt{\alpha_1^2+\alpha_2^2+\alpha_3^2}\right)\cdot\dfrac{\alpha_2+i\alpha_1}{\sqrt{\alpha_1^2+\alpha_2^2+\alpha_3^2}}\end{cases} \tag{21.40}$$

如取α球坐标(θ,φ,α)为参数，则有

$$\begin{cases}\beta=\cos\dfrac{\alpha}{2}-i\sin\dfrac{\alpha}{2}\cos\theta=e^{-i\frac{\alpha}{2}}\cos^2\dfrac{\theta}{2}+e^{i\frac{\alpha}{2}}\sin^2\dfrac{\theta}{2}\\ \gamma=-\sin\dfrac{\alpha}{2}\sin\theta(\sin\varphi+i\cos\varphi)=-i\sin\dfrac{\alpha}{2}\sin\theta e^{-i\varphi}\end{cases} \tag{21.41}$$

如取欧拉角(φ,θ,ψ)为参数，则由(7.20)式可立即看出

$$\begin{cases}\beta=e^{-i\frac{\varphi+\psi}{2}}\cdot\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \gamma=-e^{-i\frac{\varphi-\psi}{2}}\cdot\sin\dfrac{\theta}{2}\end{cases} \tag{21.42}$$

比较以上三式，可见以欧拉角为参数时，群元的矩阵和不可约矩阵都有较简单的形式。所以，在需要写出这些矩阵的显式时

总是以欧拉角为参数的。将(21.42)代入(21.39)便得以欧拉角为参数的$D^{(J)}(\varphi,\theta,\psi)$的阵元公式

$$D^{(J)}_{M'M}(\varphi,\theta,\psi)$$
$$=\sum_l(-1)^l\frac{[(J+M)!\,(J-M)!\,(J+M')!\,(J-M')!\,]^{\frac{1}{2}}}{(J-M-l)!\,(J+M'-l)!\,(M-M'+l)!\,l!}$$
$$\cdot e^{-iM'\varphi}\left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{2J+M'-M-2l}$$
$$\cdot\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)^{M-M'+2l}e^{-iM\psi}\tag{21.43}$$

其中删去了一个因子$(-1)^{M-M'}$。

以上结果对$SU(2)$和$SO(3)$均适用，所不同的是参数α和ψ的变化范围不同；J的取值不同：对$SU(2)$ J取一切整数和半奇数，而对$SO(3)$ J取整数，半奇数的J给出$SO(3)$的双值表示。

§22 转动算子与角动量

22.1 态矢空间中的转动算子

普通三维空间的转动群$SO(3)$的元是这个空间中的转动操作$g(\alpha)$，但在1.3小节中我们曾经指出，这种操作也可以对物理系统施行，这就表现为在系统的态矢空间中进行一个相应的变换$\hat{g}(\alpha)$，而$\hat{g}(\alpha)$是线性的和幺正的并与$g(\alpha)$有同态关系。当$\hat{g}(\alpha)$是作用于整个态矢空间(无穷维的)上的算子时，$\hat{g}$与g一般是一对一的（当$g\neq g'$时，由于态矢空间中的ψ的任意性很大，总可选出使$\hat{g}\psi_0\neq\hat{g}\psi_0$的$\psi_0$，例如对(1.4)就显然能做到这一点）。因此，群$\{\hat{g}(\alpha)\}$与$SO(3)$是同构的，二者作为抽象群看待时是相同的。例如，两者的无穷小生成元虽然具体意义不同，但有相同的对易关系。即$\{\hat{g}(\alpha)\}$是$SO(3)$的无穷维的忠

实表示。公式(21.5)用于$\hat{g}(\boldsymbol{\alpha})$便得

$$\hat{g}(\boldsymbol{\alpha})=e^{-i\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{\alpha}} \tag{22.1}$$

$$\begin{cases}\hat{\boldsymbol{J}}^{+}=\hat{\boldsymbol{J}}\\ \hat{\boldsymbol{J}}\times\hat{\boldsymbol{J}}=i\hat{\boldsymbol{J}}\end{cases} \tag{22.2}$$

在量子力学中，(22.2)被当作是角动量的一般定义。从变换的角度看，角动量也可定义为态矢空间中的转动算子群的无穷小生成元或$SO(3)$的无穷小算子（差一因子$(-i)$）。事实上，角动量的对易关系是由$SO(3)$的结构常数决定的。注意到$SO(3)$只是李群的一个特例，就不难理解后一观点具有更高的概括性。

角动量算子的具体形式是由态矢的形式决定的。例如，对于单粒子的非相对论性运动，当略去自旋效应时，态矢可用坐标的复值函数$\psi(\boldsymbol{r})$表示。这时$\hat{g}$对态矢的作用被定义为(1.4)，由此可导出转动算子的解析形式(1.9)。对照一般公式(22.1)，便得出

$$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}=\frac{1}{i}\boldsymbol{r}\times\nabla=\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}} \tag{22.3}$$

在公式(22.1)至(22.3)中，已经略去了角动量中的物理常数$\hbar$。考虑自旋时，单粒子的态矢应为包含自旋变数的波函数$\psi(\boldsymbol{r},s_z)$。假定s_z只有两个数值（如电子的情形），也可将$\psi(\boldsymbol{r},s_z)$写为

$$\begin{pmatrix}\psi_1(\boldsymbol{r})\\ \psi_2(\boldsymbol{r})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\psi\left(\boldsymbol{r},\ \frac{1}{2}\right)\\ \psi\left(\boldsymbol{r},-\frac{1}{2}\right)\end{pmatrix}=\Psi(\boldsymbol{r}) \tag{22.4}$$

设$g=g(\boldsymbol{r})\in SO(3)$，如$g\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}'$，则$\hat{g}=\hat{g}(\boldsymbol{\alpha})$对$\Psi(\boldsymbol{r})$的作用可写为

$$\hat{g}\Psi(\boldsymbol{r})=\Psi'(\boldsymbol{r}) \tag{22.5}$$

为了不改变态之间的线性关系，转动算子$\hat{g}$应当是线性的

$$\begin{cases}\psi_1'(\boldsymbol{r}')=T_{11}(g)\psi_1(\boldsymbol{r})+T_{12}(g)\psi_2(\boldsymbol{r})\\ \psi_2'(\boldsymbol{r}')=T_{21}(g)\psi_1(\boldsymbol{r})+T_{22}(g)\psi_2(\boldsymbol{r})\end{cases} \tag{22.6}$$

即有

$$\Psi'(\boldsymbol{r}')=T(g)\Psi(\boldsymbol{r}) \tag{22.7}$$

或代入$\boldsymbol{r}'=g\boldsymbol{r}$写为

$$\Psi'(\boldsymbol{r})=T(g)\Psi(g^{-1}\boldsymbol{r}) \tag{22.8}$$

利用已知的$\Psi(g^{-1}\boldsymbol{r})=e^{-i\hat{\mathbf{L}}\cdot\boldsymbol{\alpha}}\Psi(\boldsymbol{r})$，上式又可写成

$$\Psi'(\boldsymbol{r})=T(g)e^{-i\hat{\mathbf{L}}\cdot\boldsymbol{\alpha}}\Psi(\boldsymbol{r})$$

对照(22.5)得

$$\hat{g}(\boldsymbol{\alpha})=T(g)e^{-\hat{\mathbf{L}}\cdot\boldsymbol{\alpha}} \tag{22.9}$$

这表明总的转动算子可以分解为分别作用于空间变数和自旋变数的两个因子之积，前者为已知的微分算子$e^{-i\hat{\mathbf{L}}\cdot\boldsymbol{\alpha}}$，后者为待定的2×2的矩阵$T(g)$。为了确定矩阵$T(g)$，首先指出它是幺正的。按转动态的定义，如空间$\boldsymbol{r}$处的体积元$dV$经转动$g$被搬到$\boldsymbol{r}'=g\boldsymbol{r}$处的$dV'$，则转动后在$dV'$内发现粒子的几率应等于转动前在$dV$内发现粒子的几率。即须有

$$(|\psi_1'(\boldsymbol{r}')|^2+|\psi_2'(\boldsymbol{r}')|^2)dV'=(|\psi_1(\boldsymbol{r})|^2+|\psi_2(\boldsymbol{r})|^2)dV$$

但

$$dV'=\frac{\partial(x',y',z')}{\partial(x,y,z)}=dV\det g\cdot dV=dV$$

因而

$$\Psi'^{+}(\boldsymbol{r}')\Psi'(\boldsymbol{r}')=\Psi^{+}(\boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{r}) \tag{22.10}$$

对比(22.7)，便得

$$T^{+}(g)T(g)=I \tag{22.11}$$

这也可以由更一般的对$\hat{g}$的幺正性要求和式(22.9)得到。(22.11)和(22.7)表明，$T(g)$形成了$SO(3)$的一个二维幺正表

示。这个表示是不可约的。因为，$SO(3)$ 的一维不可约表示 $D^{(0)}$是单位表示

$$D^{(0)}(g)=1 \tag{22.12}$$

故若 $T(g)$可约，即

$$S^{-1}T(g)S=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

则有

$$T(g)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\quad g\in SO(3)$$

但这是不可能的，因为$\{T(g),\ g\in SO(3)\}$内必含非恒等变换。例如自旋的 z 分量为$+\frac{1}{2}$的态$\begin{pmatrix}\psi_1\\ 0\end{pmatrix}$经转动 $\boldsymbol{\alpha}=\pi\boldsymbol{x}_0$ 后应变为自旋的 z 分量为$\left(-\frac{1}{2}\right)$的态$\begin{pmatrix}0\\ \psi_2\end{pmatrix}$，即有

$$T(\pi\boldsymbol{x}_0)=\begin{pmatrix}0 & e^{i\lambda}\\ e^{-i\lambda'} & 0\end{pmatrix}$$

所以 $T(g)$必不可约。而 $SU(2)$ 的二维幺正不可约表示是 $D^{(\frac{1}{2})}$，从而得出

$$\begin{aligned}T(g)&=D^{(\frac{1}{2})}(g)\\ &=e^{-i\left[\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\alpha_1+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\alpha_2+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\alpha_3\right]}\end{aligned} \tag{22.13}$$

参看§7的(7.4)、(7.10)和(7.11)可知，$D^{(\frac{1}{2})}(\boldsymbol{\alpha})$就是 $SU(2)$ 的元$u(\boldsymbol{\alpha})$。(22.13)又可写为

$$\begin{cases} T(\alpha)=e^{-i\hat{S}\cdot\alpha} \\ \hat{S}=\frac{1}{2}\hat{\sigma} \end{cases} \tag{22.14}$$

S是粒子的自旋角动量（同样略去了常数$\hbar$）。代入(22.9)，得总转动算子

$$\hat{g}(\alpha)=e^{-i\hat{S}\cdot\alpha}e^{-i\hat{L}\cdot\alpha}=e^{-i(\hat{L}+\hat{S})\cdot\alpha} \tag{22.15}$$

其中用到L与S互易（二者作用于不同的独立变数）。由(22.15)和(22.1)可知，这时体系的角动量算子为

$$\hat{J}=\hat{L}+\hat{S} \tag{22.16}$$

为了求得某体系的角动量算子的形式，一般并不需先作出其转动算子的整体形状，而只需作出无穷小转动的算子即可。当α充分小时，(22.1)可化为（只保留α的一次项）

$$\hat{g}(\alpha)=1-i\hat{J}\cdot\alpha \tag{22.17}$$

或

$$\hat{J}_l=i\frac{\partial\hat{g}}{\partial\alpha_l}\bigg|_{\alpha=0} \tag{22.18}$$

方便的作法是，先由(22.17)或(22.18)求得$\hat{J}$，代入(22.1)即得$\hat{g}(\alpha)$。

22.2 角动量算子的不变子空间

设$\mathscr{V}$是体系态矢空间的一个有限维子空间，并且$\mathscr{V}$在体系的算子$\hat{J}$下不变，则$\mathscr{V}$在$\hat{g}(\alpha)$下也不变。这时，$\hat{g}(\alpha)$在$\mathscr{V}$内的导出算子（缩小）便形成$SO(3)$的一个以$\mathscr{V}$为表示空间的有限维表示。因此，$\hat{J}$的每个不变子空间都是$SO(3)$的一个表示空间。我们来研究这个表示（空间）的约化问题。

在21.1节中已经表明，把$\mathscr{V}$按$SO(3)$约化等同于按($\hat{J}_1$, $\hat{J}_2$,$\hat{J}_3$)约化（分解为$\hat{J}$的最小不变子空间的直和），21.2节的讨论中已经包含了实现这一约化的方法。考虑本征值问题

$$\hat{J}_3\psi = M\psi \tag{22.19}$$

求出(22.19)在$\mathscr{V}$中的最大本征值J及相应的独立本征矢（归一的）$\psi_{1JJ}, \psi_{2JJ}, \cdots, \psi_{a_JJJ}$。由每个本征矢产生一组不可约表示的基

$$\psi_{pJJ}, \psi_{pJJ-1}, \cdots, \psi_{pJM}, \cdots, \psi_{pJ-J}$$

其中（见(21.19)和(21.13)）

$$\begin{cases} \psi_{pJM} = \left[(2J)!\dfrac{(J-M)!}{(J+M)!}\right]^{-1/2} \hat{J}_-^{J-M}\psi_{pJJ} \\ M = J, J-1, \cdots, -J \end{cases} \tag{22.20}$$

这样共得a_J组等价的不可约表示基（$p=1,2,\cdots,a_J$），它们按同一不可约表示$D^{(J)}$变换，a_J正是$D^{(J)}$的重复度。易证这a_J组基是彼此独立的。若

$$\sum_{pM} c_{pM}\psi_{pJM} = \sum_M \left(\sum_p c_{pM}\psi_{pJM}\right) = 0$$

则由于上式括号内的矢量是$\hat{J}_3$的属于M的本征矢，而属于不同M的本征矢量是正交的，所以有

$$\begin{aligned} &\sum_p C_{pM}\psi_{pJM} \\ &= \left[(2J)!\frac{(J-M)!}{(J+M)!}\right]^{-\frac{1}{2}} \hat{J}_-^{J-M}\left(\sum_p c_{pM}\psi_{pJJ}\right) = 0 \end{aligned}$$

上式括号内的矢量若不等于零，则因它也是$\hat{J}_3$的属于J的本征矢，由(21.20)的第二式可见，当$M \geqslant -J$时上式不可能为零。故必有

$$\sum_p c_{pM}\psi_{pJJ} = 0$$

但$\psi_{1JJ}, \psi_{2JJ}, \cdots, \psi_{a_JJJ}$已取为线性无关的，所以必须

$$C_{pM} = 0, M = J, J-1, \cdots, -J, p = 1, 2, \cdots, a_J$$

这就证明了所有的ψ_{pJM}是线性无关的。设将这a_J个不可约子空间分离出来后，$\mathscr{V}$中的剩余空间为$\mathscr{V}'$。再在$\mathscr{V}'$中求(22.19)

的最大本征值J'和相应的独立本征函数并重复上面的步骤，同样可将以J'为标记的等价不可约子空间分离出来。由于$\mathscr{V}$是有限维的，继续作下去最终将完成$\mathscr{V}$的约化（分解），即将得到$\mathscr{V}$的一组对称基。

上述的约化方法（建立$\mathscr{V}$中的对称基的方法）还可以简化。引入角动量平方算子

$$\hat{J}^2=\hat{J}_1^2+\hat{J}_2^2+\hat{J}_3^2=\frac{1}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_-+\hat{J}_-\hat{J}_+)+\hat{J}_3^2 \qquad (22.21)$$

由(21.20)易证，任意一组按$D^{(J)}$变换的标准基$\{\psi_M; M=J, J-1,\cdots,-J\}$是$\hat{J}^2$的属于本征值$J(J+1)$的本征函数

$$\hat{J}^2\psi_M=J(J+1)\psi_M, M=J,J-1,\cdots,-J \qquad (22.22)$$

可见，不可约表示$D^{(J)}$的分类标记J乃是$\hat{J}^2$的本征值的量子数，而不可约表示空间乃是$\hat{J}^2$的相应的本征子空间。在由$\hat{J}^2$的量子数J标志的不可约表示空间中，$\hat{J}_3$的本征值为$J,J-1,\cdots,-J$；标准不可约基是$\{\hat{J}^2,\hat{J}_3\}$的共同本征矢。从而得出空间$\mathscr{V}$的如下的约化方案：在$\mathscr{V}$内求问题

$$\begin{cases}\hat{J}^2\psi=J(J+1)\psi\\ \hat{J}_3\psi=J\psi\end{cases} \qquad (22.23)$$

的本值J和相应的独立本征函数$\psi_{1JJ},\psi_{2JJ},\cdots,\psi_{pJJ},\cdots,\psi_{a_JJJ}$；由每个$\psi_{pJJ}$出发，经(22.20)生成一组按$D^{(J)}$变换的不可约基$\{\psi_{pJJ},\psi_{pJJ-1},\cdots,\psi_{pJM},\cdots,\psi_{pJ-J}\}$，共有$a_J$组按$D^{(J)}$变换的等价基。对于所有本征值，这些基矢的完全集$\{\psi_{pJM}; J=J_1,J_2,\cdots; p=1,2,\cdots,a_J; M=J, J-1,\cdots,-J\}$便是空间$\mathscr{V}$的对称基。

22.3 角动量的耦合与表示$D^{(j)}\otimes D^{(j')}$的约化

设某一体系由两个子系组成，子系的角动量算子分别为$\hat{\boldsymbol{j}}$和$\hat{\boldsymbol{j}}'$，分别作用于子系的态矢空间$\mathscr{U}$和$\mathscr{U}'$；则体系的态矢空间$\mathscr{V}=\mathscr{U}\otimes\mathscr{U}'$（见13.2节），而体系的转动算子

$$\hat{g}(\alpha)=e^{-i\hat{j}\cdot\alpha}\cdot e^{-i\hat{j}'\cdot\alpha}=e^{-i(\hat{j}+\hat{j}')\cdot\alpha} \tag{22.24}$$

（注意$\hat{j}$与$\hat{j}'$作用于不同的变数，因而互易）。由此得体系的总角动量

$$\hat{J}=\hat{j}+\hat{j}'$$

如果已知两个子系的角动量平方有确定值，其量子数分别为 j 和 j'，则体系的态矢空间显然由 $\{\psi_{jm}(1)\psi_{j'm'}(2):m=j,j-1,-j;m'=j',j'-1,-j'\}$ 张成。这个空间在 $\hat{g}(\alpha)$ 下是不变的，并按$SO(3)$的表示$D^{(j)}\otimes D^{(j')}$变换。根据前面的分析，求在上述条件下 $\hat{J}^2$ 的可能值和$(\hat{J}^2,\hat{J}_3)$的共同本征态，相当于求出上述空间的对称基，或将表示$D^{(j)}\otimes D^{(j')}$进行约化。

为了确定$D^{(j)}\otimes D^{(j')}$中的各个不可约成分及其重复度，只须计算特征标

$$\begin{aligned}
&\chi^{(j)}(\alpha)\chi^{(j')}(\alpha)\\
&=\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)\alpha\sin\left(j'+\frac{1}{2}\right)\alpha\Big/\sin^2\frac{\alpha}{2}\\
&=\frac{1}{2}[\cos|j-j'|\alpha-\cos(j+j'+1)\alpha]\Big/\sin^2\frac{\alpha}{2}\\
&=\frac{1}{2}\sum_{J=|j-j'|}^{j+j'}[\cos J\alpha-\cos(J+1)\alpha]\Big/\sin^2\frac{\alpha}{2}\\
&=\sum_{J=|j-j'|}^{j+j'}\sin\left(J+\frac{1}{2}\right)\alpha\Big/\sin\frac{\alpha}{2}=\sum_{J=|j-j'|}^{j+j'}\chi^{(J)}(\alpha)
\end{aligned}$$

从而得

$$D^{(j)}\otimes D^{(j')}=D^{(j+j')}\oplus D^{(j+j'-1)}\oplus\cdots\oplus D^{(|j-j'|)} \tag{22.25}$$

(22.25)常称为直积表示约化的C—G(Clebsch—Gordan)级数。它表明在$D^{(j)}\otimes D^{(j')}$的分解中只有以 $J=|j-j'|,|j-j'|+1,\cdots,(j+j')$为标记的 $D^{(J)}$才能出现，且各自出现1次。J

的这些值也就是总（耦合）角动量的量子数在所给条件下的可取值。

直积表示空间中的对称基$\Psi_{JM}(1,2)$（注意这时$a_J=1$，对给定的(J,M)只有一个Ψ_{JM}，因而不需加脚标 p），可以写为原基的组合

$$\Psi_{JM}(1,2)=\sum_{mm'}S^{jj'}_{mm',JM}\psi_{jm}(1)\psi_{j'm'}(2) \qquad (22.26)$$

其中的变换系数称为C—G系数或耦合系数。显然矩阵$S^{jj'}=(S^{jj'}_{mm',JM})$($mm'$为行标，$JM$为列标）便是实现约化(22.25)的变换矩阵。注意(22.26)中的$\Psi_{JM}(1,2)$是算子$\hat{j}^2$，$\hat{j}'^2$，$\hat{J}^2$和$\hat{J}_3$的共同本征态，相应量子数分别为j，j'，J和M；$\Psi_{jm}(1)$是$\hat{j}^2$、$\hat{j}_3$的本征态，量子数为j、m；$\psi_{j'm'}(2)$是$\hat{j}'$、$\hat{j}_3$的本征态，量子数为j'、m'；因而$\psi_{jm}(1)\psi_{j'm'}(2)$是$\hat{j}^2$、$\hat{j}_3$、$\hat{j}'^2$和$\hat{j}'_3$的共同本征态，相应的的量子数为$j$、$m$、$j'$、$m'$、用狄拉克符号可写为

$$|jj'JM\rangle=\Psi_{JM}(1,2)$$
$$|jmj'm'\rangle=|jm\rangle|j'm'\rangle=\psi_{jm}(1)\psi_{j'm'}(2)$$

C—G系数可用以下符号表示

$$S^{jj'}_{mm',JM}=(jmj'm'|JM)=(mm'|JM) \qquad (22.27)$$

这样可将(22.26)写为

$$|jj'JM\rangle=\sum_{mm'}(jmj'm'|JM)|jmj'm'\rangle \qquad (22.28)$$

利用上小节中给出的方法可以计算对称基，即定出C—G系数。需注意，这时(22.23)中的待定本征值J是已知的：$J=j+j'$，$j+j'-1,\cdots,|j-j'|$，所以只要对各本征值求本征函数。

下面用$j'=\frac{1}{2}$的特别情况为例，来说明这种推导方法。这时$j=0$的情形没有意义，不必讨论，因而有$j\geqslant j'$。首先要由(22.23)定出基$|jj'JJ\rangle$。不难看出，其中的第二个方程要求，

在 $|jj'JJ\rangle$的展开式(22.28)中不满足关系$m+m'=J$的系数必为零；再注意$m'=\frac{1}{2}$，$-\frac{1}{2}, j\geqslant m\geqslant -j$，便可对 $J=j+\frac{1}{2}$和$J=j-\frac{1}{2}$两个值写出$M=J$的基矢 $|jj'JJ\rangle$

$$\left|j,\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$=\left(j,j,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|j+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)\left|j,j,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \quad (22.29)$$

$$\left|j,\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$=\left(j,j-1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|j-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)\left|j,j-1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$+\left(j,j,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\middle|j-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)\left|j,j,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$(22.30)$$

由归一化条件，(22.29)右边的系数应为$e^{i\alpha}$(α为实数)，这个任意相因子可取为1($\alpha=0$)，则得

$$\left(j,j,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|j+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right)=1 \quad (22.31)$$

将(22.30)代入(22.23)的第一个方程，并注意

$$\hat{J}^2=\hat{j}^2+\hat{j}'^2+\hat{j}_+\hat{j}'_-+\hat{j}_-\hat{j}'_++2\hat{j}_3\hat{j}'_3 \quad (22.32)$$

和(21.20)，可得到关于(22.30)中的两个待定系数的方程（只有一个独立的）

$$\sqrt{2j}\left(j-1,\frac{1}{2}\middle|j-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)+\left(j,-\frac{1}{2}\middle|j-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)=0$$

式中系数的指标 j 和 $j'=\frac{1}{2}$ 已被省去。由(22.30)的归一化条件，并令其中第二个系数的任意相因子为1，可得

$$\begin{cases}\left(j,-\frac{1}{2}\middle|j-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\frac{2j}{2j+1}}\\ \left(j-1,\frac{1}{2}\middle|j-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right)=-\frac{1}{\sqrt{2j+1}}\end{cases}\tag{22.33}$$

将(22.31)和(22.33)分别代入(22.29)和(22.30)，得到

$$\left|j,\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}\right\rangle=\left|j,j,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\tag{22.34}$$

$$\begin{aligned}&\left|j,\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}\right\rangle\\&=-\frac{1}{\sqrt{2j+1}}\left|j,j-1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\\&\quad+\sqrt{\frac{2j}{2j+1}}\left|j,j,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\end{aligned}\tag{22.35}$$

其余的归一化的对称基可由这两个 $M=J$ 型的基通过(22.20)得到。将(22.34)和(22.35)代入(22.20)并利用(21.20)的第二个式子，便可得

$$\begin{aligned}&\left|j,\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},M\right\rangle\\&=\sqrt{\frac{j+M+\frac{1}{2}}{2j+1}}\left|j,M-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\\&\quad+\sqrt{\frac{j-M+\frac{1}{2}}{2j+1}}\left|j,M+\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&\left|j,\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},M\right\rangle \\
&=-\sqrt{\frac{j-M+\frac{1}{2}}{2j+1}}\left|j,M-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \\
&\quad+\sqrt{\frac{j+M+\frac{1}{2}}{2j+1}}\left|j,M+\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle
\end{aligned}
\tag{22.36}
$$

(注意 $\hat{J}_-=\hat{j}_-+\hat{j}'_-$，并对$\hat{j}_-$和 $\hat{j}'_-$ 应用(21.20)）。(22.36)就是$D^{(j)}\otimes D^{(\frac{1}{2})}$的表示空间的对称基，其对原基的展开系数就是C—G系数。直积表示在新基下的矩阵为$D^{(j+\frac{1}{2})}\oplus D^{(j-\frac{1}{2})}$。

由(22.20)知，以上作出的对称基不但是正交的（自厄算子的本征矢），而且也是归一的。因而所得的C－G系数组成的变换矩阵是幺正的。又在计算中已将所有的相因子取为1，这些系数全是实的。所以变换矩阵乃是实正交矩阵，而C—G系数满足相应的实正交条件。

22.4 *C—G*系数的明显公式

运用不变量的技巧可以导出一个关于耦合系数的明显表达式。

设变量(x_1,x_2)和(y_1,y_2)都按$SU(2)$的矩阵

$$
u=\begin{pmatrix}\beta & \gamma\\ -\gamma^* & \beta^*\end{pmatrix}
$$

变换，如(21.35)；则如前所述

$$
\begin{cases}
X_{jm}=x_1^{j+m}x_2^{j-m}/\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}\\
m=j,j-1,\cdots,-j
\end{cases}
\tag{22.37}
$$

和

$$\begin{cases} Y_{j'm'}=y_1^{j'+m'}y_2^{j'-m'}/\sqrt{(j'+m')!\,(j'-m')!} \\ m'=j',j'-1,\cdots,-j' \end{cases} \tag{22.38}$$

将分别按 $SU(2)$ 的表示 $D^{(j)}(u)=D^{(j)}(\beta,\gamma)$ 和 $D^{(j')}(u)=D^{(j')}(\beta,\gamma)$变换。若知

$$\begin{cases} Z_{JM}=\sum\limits_{mm'} C_{mm',JM}X_{jm}Y_{j'm'} \\ M=J,J-1,\cdots,-J \end{cases} \tag{22.39}$$

按$SU(2)$的表示$D^{(J)}(u)$变换，则$C_{mm'}$就是（或正比于）待求的C—G系数$(mm'|JM)$。由以上三式可以看出，Z_{JM}乃是关于(x_1,x_2)的$2j$次齐次式及关于(y_1,y_2)的$2j'$次齐次式。反之，任意一个这样的齐次式显然都能展为(22.39)的形状。因此，我们的问题就化为造出一组按$D^{(J)}(u)$变换的上述齐次多项式$\{Z_{JM}(x_1,x_2;\ y_1,y_2);\ M=J,J-1,\cdots,-J\}$，然后计算其按(22.39)的形状展开的系数。为了得到这样一组齐次多项式，再引入变量(w_1,w_2)，令其按u的逆转置矩阵

$$\tilde{u}^{-1}=u^*=\begin{pmatrix} \beta^* & \gamma^* \\ -\gamma & \beta \end{pmatrix}$$

（注意$u^+=\tilde{u}^*=u^{-1}$）变换。这时$(x_1w_1+x_2w_2)$和$(y_1w_1+y_2w_2)$显然都是不变量。例如

$$(x_1',x_2')\begin{pmatrix} w_1' \\ w_2' \end{pmatrix}=(x_1,x_2)uu^{-1}\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}=(x_1x_2)\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}$$

并且，如果

$$P=\sum_{M=-J}^{J}Z_{JM}W_{JM}\quad\left(W_{JM}=\frac{w_1^{J+M}w_2^{J-M}}{\sqrt{(J+M)!\,(J-M)!}}\right)$$

是$SU(2)$的不变量，则Z_{JM}必按$D^{(J)}$变换。这是因为，(w_1,w_2)按u^*变换蕴含$\{W_{JM}\}$按表示$D^{(J)}(u^*)$变换，如$\{Z_{JM}\}$的变

换矩阵为A，则P的不变性要求

$$A\tilde{D}^{(J)}(u^*)=I$$

由(21.39)知$D^{(J)}(u^*)=[D^{(J)}(u)]^*$，上式又可写为

$$A[D^{(J)}(u)]^+=A[D^{(J)}(u)]^{-1}=I$$

所以有

$$A=D^{(J)}(u)$$

这样问题又可转化为求一个在$SU(2)$下不变的量P，P是(x_1, x_2)的$2j$次齐次式、(y_1,y_2)的$2j'$次齐次式、(w_1,w_2)的$2J$次齐次式。P对(w_1,w_2)的展开式中的W_{JM}的系数即是要造出的Z_{JM}。下面写出的多项式就是符合以上要求的不变量。

$$P \doteq (x_1y_2-x_2y_1)^{j+j'-J}(x_1w_1+x_2w_2)^{j-j'+J}(y_1w_1+y_2w_2)^{j'-j+J} \tag{22.40}$$

其中因子$(x_1y_2-x_2y_1)$的不变性可如下证明：将(x_1,x_2)和(y_1, y_2)的变换式

$$(x_1',x_2')=(x_1,x_2)u \text{和} (y_1',y_2')=(y_1,y_2)u$$

合并为

$$\begin{pmatrix} x_1' & x_2' \\ y_1' & y_2' \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ y_1 & y_2 \end{pmatrix}u$$

对上式两边取行列式，并注意$\det u=1$，即得

$$x_1'y_2'-x_2'y_1'=x_1y_2-x_2y_1$$

可见$(x_1y_2-x_2y_1)$确为$SU(2)$的不变量。

剩下的工作就是计算(22.40)的展开系数了。应用二项式的展开公式，有

$$(x_1y_2-x_2y_1)^{j+j'-J}$$

$$=\sum_{\nu}\frac{(j+j'-J)!}{\nu!\,(j+j'-J-\nu)!}(x_1y_2)^{j+j'-J-\nu}\cdot(x_2y_1)^{\nu}\cdot(-1)^{\nu}$$

$$(x_1w_1+x_2w_2)^{j-j'+J}$$

$$=\sum_{\mu}\frac{(j-j'+J)!}{\mu!(j-j'+J-\mu)!}(x_1w_1)^{j-j'+J-\mu}(x_2w_2)^{\mu}$$

$$(y_1w_1+y_2w_2)^{j'-j+J}$$

$$=\sum_{\gamma}\frac{(j'-j+J)!}{\gamma!(j'-j+J-\gamma)!}(y_1w_1)^{j'-j+J-\gamma}(y_2w_2)^{\gamma}$$

代入(22.40)，加以整理，并令

$$m=j-\nu-\mu$$
$$m'=-j+J+\nu-\gamma$$
$$M=m+m'=J-\mu-\gamma$$

按上式以m和m'分别代替μ和γ后，P中的求和号可写为

$$\sum_{\nu\mu\gamma}=\sum_{\nu}\sum_{mm'}$$

对 m和 m'的求和又可这样进行：先对所有 $m+m'=M$ 的m和m'求和，再对不同的M求和，即

$$\sum_{mm'}=\sum_{M=-J}^{J}\sum_{m+m'=M}$$

由M与ν无关可以看出，这个求和号与$\sum_{\nu}$可交换，从而P中的求和次序最后可写为

$$\sum_{M=-J}^{J}\sum_{m+m'=M}\sum_{\nu}$$

于是可得

$$P=\sum_{M=-J}^{J}Z_{JM}W_{JM}$$

其中

$$Z_{JM}=(j+j'-J)!(j-j'+J)!(j'-j+J)!\cdot\sum_{m+m'=M}C^{J}_{mm'},X_{jM}Y_{j'M'} \qquad (22.41)$$

$$C^J_{mm'}=\sum_\nu(-1)^\nu[(j+m)!\,(j-m)!\,(j'+m')!\,(j'-m')!\,(J+M)!\,(J-M)!\,]^{\frac{1}{2}}[(j-m-\nu)!\,(-j'+J+m+\nu)!\,(j'+m'-\nu)!\,(-j+J-m'+\nu)!\,\nu!\,(j+j'-J-\nu)!\,]^{-1} \tag{22.42}$$

其中整数 ν 的取值限制是使每个阶乘因子中的数是非负的。也可取消这一限制，而代以约定：当$n<0$时，$n!=\infty$。(22.41)和(22.42)表明，耦合系数应为

$$(jmj'm'|JM)=a_JC^J_{mm'} \tag{22.43}$$

其中a_J是归一化常数，可由Z_{JJ}的归一化条件确定

$$a_J=\Big[\sum_{m+m'=J}|C^J_{mm'}|^2\Big]^{-1/2}$$

由(22.42)可见，当$M=m+m'=J$时，$C^J_{mm'}$的和式中只有$\nu=j-m$的一项异于零，有

$$C^J_{mm'}=(-1)^{j-m}\frac{\sqrt{(2J)!}}{(j-j'+J)(j'-j+J)!}\cdot\sqrt{\frac{(j+m)!\,(j'+m')!}{(j-m)!\,(j'-m')!}}$$

$$=(-1)^{j-m}\sqrt{\frac{(2J)!}{(j-j'+J)!\,(j'-j+J)!}}\cdot\sqrt{\binom{j+m}{j'-m'}\binom{j'+m'}{j-m}}$$

代入a_J的式子，利用组合公式

$$\sum_{l=0}^k\binom{m+l}{l}\binom{n-l}{k-l}=\binom{m+n+1}{k}$$

算出

$$\sum_{m+m'=J}\binom{j+m}{j'-m'}\binom{j'+m'}{j-m}=\binom{j+j'+J+1}{j+j'-J}$$
$$=\frac{(j+j'+J+1)!}{(j+j'-J)!(2J+1)!}$$

可得

$$a_J=\sqrt{(2J+1)\frac{(j+j'-J)!(j-j'+J)!(j'-j+J)!}{(j+j'+J+1)!}} \tag{22.44}$$

将(22.42)和(22.44)代入(22.43)，便得C—G系数的拉卡表示式

$$\begin{aligned}(jmj'm'|JM)&=\delta_{M,m+m'}\\&\cdot\Big[(2J+1)\frac{(j+j'-J)!(j-j'+J)!(j'-j+J)!}{(j+j'+J+1)!}\\&\cdot(j+m)!(j-m)!(j'+m')!(j'-m')!(J+M)!\\&\cdot(J-M)!\Big]^{1/2}\cdot\sum_\nu(-1)^\nu\big[(j-m-\nu)!\\&\cdot(-j'+J+m+\nu)!(j'+m'-\nu)!(-j+J-m'+\nu)!\\&\cdot\nu!(j+j'-J-\nu)!\big]^{-1}\end{aligned} \tag{22.45}$$

其中非零系数的条件 $m+m'=M$已用因子 $\delta_{M,m+m'}$ 来体现，而 $|j-j'|\leqslant J\leqslant(j+j')$的条件则自然地含于$\sum_\nu$号下的诸除乘因子内的数的非负条件中。

C—G系数在应用上很重要，已有各种类型的表可查，具体运用时并不需要从复杂的(22.45)出发进行计算。但利用(22.45)可以很方便地导出C—G系数的一系列重要的对称性质。所有这些对称性质，都可以用维格纳(Wigner)的“3—j”符号十分简洁地表示出。3—j符号的定义是：

$$\begin{pmatrix}j, j', J\\ m, m', M\end{pmatrix}=(-1)^{j-j'-M}\cdot\frac{(jmj'm'|J-M)}{\sqrt{2J+1}} \tag{22.46}$$

所说的对称性为

1° 在列的偶置换下不变；

2° 在列的奇置换下，等于乘以因子$(-1)^{j+j'+J}$；

3° 第二行改变符号，等于乘以因子$(-1)^{j+j'+J}$。

§23 李羣的李代数

32.1 无穷小生成元与无穷小算子

我们对于$SO(3)$和$SU(2)$这两个李群及其表示已经作了相当详尽的讨论。这样作的理由，除了它们本身在应用上的重要性之外，还在于它们可以作为一般李群的一个比较理想的范例。事实上，关于这两个群的许多概念都可以推广到一般李群中去；当我们在李群的一般理论中能够找出其中的概念和原理在$SO(3)$和$SU(2)$中的对应物，而将前者看作是后者的某种推广并加以比较时，就会使接受和理解一般理论的难度大为降低。这对于初学者来说，也许是一条有益的经验。

以下的讨论只限于李群的局部的性质，因而只涉及含有单位元的那个连通分支。在9.2小节中已经表明，局部李群的元可以由无穷小生成元来生成。设n维（局部）李群G的参数取为$u=(u_1,u_2,\cdots,u_n)$，并假定$g\in G$是线性算子或矩阵，则单位元$I=g(0)$附近（无穷小邻域内）的元能写为

$$g=I+I_1du_1+I_2du_2+\cdots+I_ndu_n \tag{23.1}$$

或

$$dg=I_1du_1+I_2du_2+\cdots+I_ndu_n \tag{23.2}$$

其中

$$I_i=\left.\frac{\partial g}{\partial u_i}\right|_{u=0},\quad i=1,2,\cdots,n \tag{23.3}$$

这n个I_i便是G的无穷小生成元。容易看出，这n个无穷小生成元是线性无关的：如果它们的组合(23.2)等于零，即$dg=0$，则由于群元g与参数u是一一对应的，必有$du_i=0$，即所有的组合系数为零。当参数作变换时，例如由u变为u'

$$u_i' = u_i'(u_1, u_2, \cdots, u_n)$$

这些函数都是双方单值的和可微的，且在单位元处为零，则(23.2)化为

$$dg = I_1' du_1' + I_2' du_2' + \cdots + I_n' du_n'$$

而

$$I_i' = \sum_k \frac{\partial u_k}{\partial u_i'}\bigg|_{u=0} \cdot I_k \qquad (23.4)$$

其中系数的行列式显然不等于零。这又表明，无穷小生成元与参数有关，在不同的参数下有不同的生成元；但(23.4)指出，当参数变换时，无穷小生成元将经一满秩的线性变换，因而两组生成元张成同一个n维线性空间。由此得出结论：n维李群G的无穷小生成元张成一个n维线性空间，给定参数下的无穷小生成元是这个空间中的一组基，参数变换时无穷小生成元的变换即是该空间中的基矢变换。这种将n维（局部）李群与一个n维线性空间相联系的观点是十分重要的，因为既然前者可由后者生成，它的运算性质原则上也可归结为后者的相应性质，从而可使李群的研究大大简化。这正是李代数方法的基础。

无穷小生成元的概念也能用另一种方式给出。设$g \in G$是某一m维空间$\{(x) = (x_1, x_2, \cdots, x_m)\}$上的连续变换，它将点$x$变为点$x' = gx$；$F(x)$是$x$的充分光滑的函数，所有这些函数的集$\{F(x)\}$形成一个线性空间；则空间$\{x\}$上的每一个变换$g$，在函数空间$\{F(x)\}$上可导出一个变换$\hat{g}$

$$\hat{g}F(x) = F(g^{-1}x) \qquad (23.5)$$

如前所述（见22.1小节），这样导出的线性算子群$\{\hat{g}\}$与群$G = \{g\}$是同构的。所以这两个群将被同时参数化。在参数u下，群$\{\hat{g}\}$的无穷小生成元为

$$\hat{I}_i = \frac{\partial \hat{g}}{\partial u_i}\bigg|_{u=0}, i=1,2,\cdots,n \tag{23.6}$$

上式也可作为群G的无穷小生成元的定义。但由$\{\hat{I}_i\}$直接生成的毕竟不是G本身，而是与G同构的算子群$\{\hat{g}\}$，所以为了加以区分，有时将(23.6)称为是G的无穷小算子。这后一种定义，没有前一定义（23.3）那样直接，但却更普遍些。事实上，(23.3)只在G是线性李群时才有意义；因为当g为线性算子或矩阵时，差Δg及商$\dfrac{\Delta g}{\Delta u_i}$才有定义。当$g$是非线性变换时，对$g$的加法和数乘运算是没有定义的，但这时(23.5)仍有意义，而$\hat{g}$总是线性算子（可以说，一般变换g通过(23.5)被线性化为$\hat{g}$），所以(23.6)总是有意义的。对于一般的古典变换李群（线性变换群是其特殊情形）只能使用定义(23.6)。

当G是线性李群时，g可写为已知矩阵，代入(23.3)便可立即算出矩阵I_i。例如，$SO(3)$在α参数下的无穷小生成元由4.4小节的(4.8)式给出。为了得到一般变换李群的无穷小算子的表达式，将$\hat{I}_i$作用于$F(x)$，并利用(23.6)和(23.5)，可写

$$\hat{I}_i F(x) = \frac{\partial}{\partial u_i}\hat{g}F(x)\bigg|_{u=0} = \frac{\partial}{\partial u_i}F(g^{-1}x)\bigg|_{u=0}$$

令点$g^{-1}(u)x$的坐标为$\varphi_1(u,x),\varphi_2(u,x),\cdots,\varphi_m(u,x)$（有$\varphi_r(0,x)=x_r$），记

$$\begin{cases} U_{ri}(x) = \dfrac{\partial \varphi_r(u,x)}{\partial u_i}\bigg|_{u=0} \\ r=1,2,\cdots,m;\ \ i=1,2,\cdots,n \end{cases} \tag{23.7}$$

则有

$$\frac{\partial}{\partial u_i}F(g^{-1}x)\bigg|_{u=0} = \sum_{r=1}^{m}\frac{\partial \varphi_r}{\partial u_i}\frac{\partial}{\partial \varphi_r}F(\varphi)\bigg|_{u=0}$$

$$= \sum_{r=1}^{m} U_{ri}(x) \frac{\partial}{\partial x_r} F(x)$$

所以

$$\hat{I}_i F(x) = \left[\sum_{r=1}^{m} U_{ri}(x) \frac{\partial}{\partial x_r} \right] F(x)$$

从而得到无穷小算子的表达式

$$\hat{I}_i = \sum_{r=1}^{m} U_{ri}(x) \frac{\partial}{\partial x_r} \tag{23.8}$$

例如，对于线性李群的情形，$g^{-1}(u)$是一个 $m \times m$ 的矩阵，有

$$\varphi_r = \sum_{r'=1}^{m} g^{-1}_{rr'}(u) x_{r'}$$

$$U_{ri}(x) = \sum_{r'=1}^{m} \left. \frac{\partial g^{-1}_{rr'}(u)}{\partial u_i} \right|_{u=0} x_{r'}$$

写成矩阵形式，(23.8)化为

$$\hat{I}_i = -\widetilde{X} \widetilde{I}_i \frac{\partial}{\partial x} \tag{23.9}$$

其中

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix} \qquad \frac{\partial}{\partial X} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_m} \end{pmatrix} \tag{23.10}$$

以上用到了

$$\frac{\partial}{\partial u_i} [g(u) g^{-1}(u)] \Big|_{u=0} = I_i + \frac{\partial}{\partial u_i} g^{-1}(u) \Big|_{u=0} = 0$$

(23.9)给出了线性李群的无穷小算子 $\hat{I}_i$ 与无穷小生成元I_i之

间的关系。特别地，对 $SO(3)$，将生成元(4.8)代入(23.9)得到

$$\hat{I}_1=-\left(x_2\frac{\partial}{\partial x_3}-x_3\frac{\partial}{\partial x_2}\right)=-i\hat{L}_1$$

$$\hat{I}_2=-\left(x_3\frac{\partial}{\partial x_1}-x_1\frac{\partial}{\partial x_3}\right)=-i\hat{L}_2 \tag{23.11}$$

$$\hat{I}_3=-\left(x_1\frac{\partial}{\partial x_2}-x_2\frac{\partial}{\partial x_1}\right)=-i\hat{L}_3$$

由于同构的群有相同的表示，所以在群表示论中可以略去 $G=\{g\}$和$\{\hat{g}\}$ 的差别，使用无穷小生成元与无穷小算子的效果是相同的。今后将主要使用符号I_i，因为所作讨论是针对线性李群的；而对于非线性的变换李群，只要将 I_i 理解为(23.6)定义的$\hat{I}_i$，全部结果仍然成立。

23.2 正则参数与指数映射

在 4.4 节中，我们已将 $SO(3)$的元对参数$\boldsymbol{\alpha}$的依赖关系写成指数函数的形式，指数是参数的线性函数。这种指数映射确定了群元与无穷小生成元所张成的三维空间中的矢量之间的一一对应（局部），从而$SO(3)$中的运算也就对应于三维空间中的某种相应的运算。我们已经利用这一点研究了$SO(3)$的结构与表示。为了把上述指数映射关系推广到一般李群，首先须表明总存在这样的群参数。

$SO(3)$ 的元并不是在任何参数之下都能写为(4.7)的形式的，对导出(4.7)或(4.6)的过程稍加分析即可看出，(4.7)之所以成立是因为参数$\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{n}\alpha$具有如下性质

$$g(\boldsymbol{n},\alpha+\alpha')=g(\boldsymbol{n},\alpha)g(\boldsymbol{n},\alpha')$$

或写为

$$g(\boldsymbol{n}\alpha+\boldsymbol{n}\alpha')=g(\boldsymbol{n}\alpha)g(\boldsymbol{n}\alpha') \tag{23.12}$$

事实上，不仅是$SO(3)$，任何一个 n 维（局部）李群都存在满

足条件(23.12)的参数

$$\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n) \tag{23.13}$$

符号$\boldsymbol{n}$和α的定义是

$$\alpha=|\boldsymbol{\alpha}|,\qquad \boldsymbol{n}=\boldsymbol{\alpha}/\alpha \tag{23.14}$$

这样的参数称为李群的（第一类）正则参数。我们来证明这一点。设李群G在某一组参数$u=(u_1,u_2,\cdots,u_n)$下的乘法函数为$\{f_i\}$

$$u_i(g_1g_2)=f_i(u(g_1);\ u(g_2)) \tag{23.15}$$

则新参数$\boldsymbol{\alpha}$（它与u互为单值解析的函数，且在单位元处都为零）的条件(23.12)也可用(23.15)表为

$$u_i(\boldsymbol{n}\alpha+\boldsymbol{n}\alpha')=f_i[u(\boldsymbol{n}\alpha);\ u(\boldsymbol{n}\alpha')] \tag{23.16}$$

这是一组关于新旧参数的变换函数$\{u_i(\boldsymbol{\alpha})\}$的函数方程（注意$f_i$是已知的）；要证明这组方程是可解的。为此，将上式化为关于待定的变换函数的微分方程。两边施行$\frac{d}{d\alpha'}$，令$\alpha'=0$，得

$$\frac{du_i}{d\alpha}=\sum_j A_jF_{ij}(u) \tag{23.17}$$

其中

$$F_{ij}(u)=\left.\frac{\partial f_i(u;u')}{\partial u_j'}\right|_{u'=0} \tag{23.18}$$

$$A_j=\sum_k\left.\frac{\partial u_j}{\partial \alpha_k}\right|_{\alpha=0}\cdot n_k \tag{23.19}$$

方程(23.17)中参数$\boldsymbol{n}=(n_1,n_2,\cdots,n_n)$是任意取定的单位矢量，所以(23.17)乃是$n$个以$\alpha$为自变数的待定函数$(u_1,u_2,\cdots,u_n)$的常微分方程组。初值条件是

$$u_i|_{\alpha=0}=0 \tag{23.20}$$

由于函数F_{ij}是足够光滑的，初值问题(23.17)、(23.20)对任

意给定的常数（矩阵）$\left.\frac{\partial u_i}{\partial \alpha_k}\right|_{\alpha=0}$ 有唯一的解 $u_i(\boldsymbol{n},\alpha)$，并且这解是自变数 α 及参数 $\boldsymbol{n}$的连续可微的函数。又由(23.19)可见，若上面的函数是初值问题的解，则函数$u_i\left(\boldsymbol{n}a,\ \frac{\alpha}{a}\right)$也是初值问题的解。所以有

$$u_i(\boldsymbol{n},\alpha)=u_i\left(\boldsymbol{n}a,\ \frac{\alpha}{a}\right)=u_i(\boldsymbol{n}\alpha,1)$$

（因 a 是任意非零常数，可取 $a=\alpha$）。可见解 u_i 实际上是 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{n}\alpha$的函数

$$u_i=u_i(\boldsymbol{\alpha}) \tag{23.21}$$

注意$\left.\frac{\partial u_i}{\partial \alpha_k}\right|_{\alpha=0}$ 是任给的，应当使其行列式不为零

$$\left.\frac{\partial(u_1,u_2,\cdots,u_n)}{\partial(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n)}\right|_{\alpha=0}\neq 0 \tag{23.22}$$

这样，(23.21)便给出了参数 u 和正则参数 $\boldsymbol{\alpha}$ 之间的双方单值的解析变换（在 $\alpha=0$的邻域）。

以上证明了正则参数的存在，同时也给出了正则参数的求法。我们看到，由老的参数 u 导出的正则参数 $\boldsymbol{\alpha}$ 并不是唯一的，保留的自由度

$$\left(\left.\frac{\partial u_i}{\partial \alpha_k}\right|_{\alpha=0}\right) \quad 或 \quad \left(\left.\frac{\partial \alpha_k}{\partial u_i}\right|_{u=0}\right)$$

可以是任意的满秩方阵。

由(23.12)出发，重复4.4小节中的推演，或者由(23.12)写出

$$g(\boldsymbol{n}\alpha)=g\left(\boldsymbol{n}\frac{\alpha}{N}\right)^N=\lim_{N\to\infty}g\left(\boldsymbol{n}\frac{\alpha}{N}\right)^N$$

$$=\lim_{N\to\infty}\left[I+\frac{\partial g}{\partial\alpha}\bigg|_{\alpha=0}\frac{\alpha}{N}\right]^N$$

$$=e^{\frac{\partial g}{\partial\alpha}\big|_{\alpha=0}\cdot\alpha}$$

（注意$\lim\limits_{N\to\infty}(1+x/N)^N=e^x$），并注意到

$$\frac{\partial g}{\partial\alpha}\bigg|_{\alpha=0}=\sum_i n_i\frac{\partial g}{\partial\alpha_i}\bigg|_{\alpha=0}=\sum_i n_iI_i$$

同样可得

$$g(\boldsymbol{\alpha})=e^{\sum\limits_i I_i\alpha_i}\tag{23.23}$$

这就证明了，由无穷小生成元张成的矢量空间到群的指数映射关系（局部），对任意李群都是存在的，而正则参数对揭示并实现这一关系具有特殊的重要性。(23.23)也可写成与 $\boldsymbol{\alpha}$ 无关的形式

$$g=e^v\tag{23.24}$$

其中 v 为G的无穷小生成元张成的空间中的元素，空间的零邻域中的 v 与群的单位元邻域中的 g，通过指数映射(23.24)建立起一一对应。由(23.23)又可看出，上述空间中的任意一组线性坐标经(23.23)成为G的一组正则参数。只要知道 n 维李群的 n 个线性独立的无穷小生成元，就可用(23.23)引入群的一组正则参数。

23.3 李代数

现在来进一步讨论无穷小生成元所张成的空间内的运算性质。这个空间的元素（矢量）是与群元 g 作用于同一空间上的线性算子或矩阵，因而可以存在三种基本的代数运算：加法，

数乘和乘法。前两种运算在其中是封闭的（构成线性空间）；但乘法运算在其中并不封闭，所以不能算是这个空间内的一种"合法"的运算。例如，$SU(2)$的无穷小生成元为$\sigma_1/2i$，$\sigma_2/2i, \sigma_3/2i$，它们显然是线性无关的，张成一个三维空间。这个空间中的元的一般形状可写为：$v=\sum_k C_k\sigma_k$，任二元的和或任一元乘以常数，显然还是空间的一个元；但对于元的乘积，例如$\sigma_1\cdot\sigma_1=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$，就不再是空间内的元了，因为$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$与三个泡利矩阵是线性无关的，它不能写为后者的线性组合。所以普通的矩阵乘法在空间$\{v=\sum_k C_k\sigma_k\}$内并不总能施行。不过，在李群的无穷小生成元张成的空间内，可以重新定义一种"乘法"。这种经过修改的"乘法"在空间中是封闭的，称为对易子积（或换位子积），也可称为李乘积。元v与u的对易子积的定义是

$$[v,u]=vu-uv \tag{23.25}$$

我们来证明这一定义的合法性，即(23.25)仍为空间中的元。设v_1和v_2是空间中的任意两个元，t_1和t_2是两个足够小的实数，则v_1t_1和v_2t_2就是零元邻域内的两个元。按(23.24)，在群的单位元的邻域内有元g_1和g_2

$$g_1=e^{v_1t_1},\quad g_2=e^{v_2t_1}$$

作此二元的积，并应用公式(4.12)，可写

$$g_1g_2=e^{v_1t_1+v_2t_2+\frac{1}{2}[v_1,v_2]t_1t_2+\cdots}$$

因g_1g_2仍为群G的一个元，故上式的指数必为空间内的一个元；又，$v_1t_1+v_2t_2$也是空间内的元，所以二者之差再除以$t_1t_2/2$，即

$$[v_1,v_2]+\cdots$$

还是空间内的元。其中删去的项，当$t_1,t_2\to 0$时，是趋于零的。

这样一来，在李群的无穷小生成元所张成的线性空间内，除了加法和数乘外，还有第三种基本代数运算——对易子积，它满足以下法则：

1° $[v_1, v_2]$对两个元的依赖都是线性的；

2° $[v_1, v_2] = -[v_2, v_1]$

3° $[v_1, [v_2, v_3]] + [v_2, [v_3, v_1]] + [v_3, [v_1, v_2]] = 0$

（这三条性质很容易由定义(23.25)证明）。

一个代数系统，如果其中定义了加法、数乘和李乘积（对易子积）三种基本运算，且对前两种运算成为线性空间，第三种（二元）运算满足上面的三条法则，则这个代数系统称为李代数。上面我们证明了，李群的无穷小生成元的集合构成一个李代数，它称为那个李群的李代数。

李代数作为线性空间的性质，我们是熟悉的。现在再对对易子积运算加以讨论。在 n 维李代数中任取一组基$\{I_1, I_2, \cdots, I_n\}$，其中任二基矢的对易子积仍为李代数的元，故必为基矢的线性组合

$$[I_i, I_j] = \sum_k C^k_{ij} I_k \tag{23.26}$$

其中系数$\{C^k_{ij}\}$称为李代数的结构常数，因为它决定着任二元的对易子积。任取二元

$$v = \sum_i v^i I_i, \quad u = \sum_i u^i I_i$$

利用(23.26)可将它们的对易子积写为

$$[v, u] = v^i u^j c^k_{ij} I_k$$

（以下对求和记号采用爱因斯坦惯例）。由此可见，$[v, u]$的第 k 个坐标为

$$[v, u]^k = c^k_{ij} v^i u^j \tag{23.27}$$

这就是以坐标的形式给出的任二元的对易子积公式。

李代数的结构常数$\{c^k_{ij}\}$有 n^3 个分量，每个分量的值与基

矢（坐标系）的选择有关。当基矢变换时，由(23.26)可以看出，结构常数也将作相应的变换，并且它关于每个下标的变换方式与基矢的变换方式相同，关于上标的变换方式与坐标的变换方式相同。所以在坐标变换下，结构常数 c_{ij}^{k} 是一个三阶的张量，上标是逆变指标，下标是协变指标。因此，结构常数作为一个张量（不是它的分量）是与坐标无关的。这正好反映了李代数的结构与坐标系无关的明显事实。

由(23.26)和对易子积的性质2°、3°，容易得出结构常数的基本性质

$$c_{ij}^{k}=-c_{ji}^{k} \tag{23.28}$$

$$c_{ij}^{h}c_{hl}^{k}+c_{jl}^{h}c_{hi}^{k}+c_{li}^{h}c_{hj}^{k}=0 \tag{23.29}$$

（注意(23.29)中三个变动的下标(i,j,l)轮换的规律）。这些都是与坐标无关的张量方程。反之，任给一组满足(23.28)和(23.29)的常数，由(23.27)定义的对易子积显然都满足运算法则1°、2°、3°，因而这组常数必为某一李代数的结构常数。

(4.14)和(7.15)表明，$SO(3)$和$SU(2)$的结构常数都是

$$c_{ij}^{k}=\varepsilon_{ijk} \tag{23.30}$$

结构常数相同的两个李代数称为是同构的。与此等价的定义是：两个李代数同构，是指二者的元之间存在一一对应，而李代数内的基本运算保持这种对应关系不变。如果上述在基本运算下保持不变的对应关系是多对一的，则由多方到一方的映射称为是同态的，并称后者为前者的同态象或后者同态于前者。

李代数的由线性算子（作用于同一空间上的）或矩阵（同阶方阵）组成的同态象，称为这个李代数的一个（线性）表示。李代数的表示的可约性和等价性等概念，则完全与群的表示的相应概念相同，这里不再重述。

如果对易子积运算在李代数的一个线性子空间中也是封闭的，它显然构成一个较小的李代数，称为原李代数的子代数。

如果在n维李代数中取基$\{I_1, I_2, \cdots, I_n\}$，使其中的前$m(<n)$个基矢$\{I_1, I_2, \cdots, I_m\}$为其子代数（$m$维的）的基，则对易子积运算在子代数中的封闭性条件将表现为

$$[I_i, I_j] = \sum_{k=1}^{m} c^k_{ij} I_k, \quad 1 \leqslant i, j \leqslant m$$

对比(23.26)，这相当于

$$c^k_{ij} = 0, \quad 1 \leqslant i, j \leqslant m, \quad m < k \leqslant n \tag{23.31}$$

因此，具有m维子代数的n维李代数中，总有使结构常数的(23.31)中那些分量等于零的坐标系。李代数本身和它的只含零元的子集是两个显然子代数，此外的子代数称为真子代数。李代数的一个子代数，如果它的每个元与李代数中任意元的对易子积仍属于这个子代数，则称为不变子代数或理想。对于有一个m维理想的n维李代数，在如上取基时，将有更多的结构常数分量为零

$$c^k_{ij} = 0, \quad 1 \leqslant (i\text{或}j) \leqslant m, \quad m < k \leqslant n \tag{23.32}$$

两个（或多个）李代数的直和，是指一个更大的李代数，它作为线性空间是前两个空间的直和；其中的对易子积在前两个李代数内分别保持原定义，这两个李代数的元之间的对易子积等于零。可见，在李代数的直和分解中，每一项都是它的一个不变子代数。将一个李代数分解为若干个子代数（理想）的直和，就意味着将它拆成更小的独立单元，从而整个李代数的结构便被简化为各单元的结构。这时有

$$c^k_{ij} = 0, \quad \text{除非}\ i、j、k\ \text{属于同一理想} \tag{23.33}$$

任意二元的对易子积都为零的李代数称为可换李代数或阿贝尔李代数。一个李代数为可换的充要条件，是其结构常数为零

$$c^k_{ij} = 0 \tag{23.24}$$

所有一维的李代数都是可换的。任意n维的可换李代数都可分

解为 n 个一维子代数的直和。

没有不变真子代数（真理想）的李代数显然不能再分解为更简单的李代数的直和，这种李代数称为单纯李代数（简称单李代数）。按这个定义，一维李代数是单纯的；但在一些定理的表述中，将一维李代数除外更方便，所以习惯上将一维李代数算作是非单纯的。没有可换不变子代数（只含零元的子代数除外）的李代数称为是半单纯的（半单的）。显然，单李代数一定是半单的；反之，半单的李代数不一定是单的，因为它可能含有非可换理想。可以证明[15]：李代数为半单的充要条件是，它可以分解为单李代数的直和。这个定理使半单李代数的概念获得明确的意义。

23.4 李群与它的李代数

指数映射(23.24)确定了李群与它的李代数之间的(局部)一一对应。据此，可以把对李群（局部）的讨论简化为关于它的李代数的纯代数问题的讨论，如前面对$SO(3)$和$SU(2)$的表示论所作的那样。为此，首先要进一步明确李群与它的李代数的关系。

(1) *李群的结构常数*

李群的结构（乘法函数）是与它的李代数的结构（结构常数）互相决定的。设在某一组正则参数下李群内的乘法可写为

$$g(\alpha)g(\beta)=g(\gamma) \tag{23.35}$$

其中 $\alpha=(\alpha^1,\alpha^2,\cdots,\alpha^n)$就是前面的 $\boldsymbol{\alpha}$，为了方便以 α 表示，不要与前面的符号$\alpha=|\boldsymbol{\alpha}|$ 相混。则乘法函数为

$$\gamma^i=f^i(\alpha;\beta) \tag{23.36}$$

将(23.23)代入(23.35)并利用(4.12)和(23.26)，可得

$$e^{\gamma^k I_k}=e^{\left(\alpha^k+\beta^k+\frac{1}{2}c^k_{ij}\alpha^i\beta^j+\cdots\right)I_k}$$

从而有

$$\gamma^k = f^k(\alpha;\beta) = \alpha^k + \beta^k + \frac{1}{2}C^k_{ij}\alpha^i\beta^j + \cdots \quad (23.37)$$

式中删节的是参数较高次的项，各项的系数都由 c^k_{ij} 的收缩乘积组成。上式是关于$SO(3)$的相应结果(4.15)的推广。(23.37)证明了前面的断语。因此，李群的李代数的结构常数也叫做这个李群的结构常数。

(2) 阿贝尔李群

李群是阿贝尔的充要条件是：它的李代数是阿贝尔的；或它的结构常数为零。

(3) 李群的李子群

李群M是李群G的一个子群，则M的李代数是G的李代数的一个子代数，而且当G的前m个参数取为M（m维）的参数时，G的结构常数满足条件(23.31)；反之，由李代数的子代数生成的李群必为由原李代数生成的李群的李子群（注意：群的乘法在其一子集内的封闭性与群的李代数的对易子积在相应的子集内的封闭性相当）。

(4) 李群的不变李子群

G的李子群N是G的不变子群的充要条件为：N的李代数是G的李代数的不变子代数；或在适当的参数下（前m个参数取为N的参数）G的结构常数满足(23.32)。这可由等式

$$e^u e^v e^{-u} = e^{v + \frac{1}{1!}[u,v] + \frac{1}{2!}[u,[u,v]] + \cdots} \quad (23.38)$$

看出。

(5) 李群的直积分解

李群等于它的若干李子群的直积的充要条件是：它的李代数等于这些子群的李代数的直和；或者它的结构常数在适当参数下满足(23.33)。（注意：群元的可易与相应的李代数的元的可易相当）

(6) 单李群与半单李群

按群直积的定义，每个因子群必为直积群的不变子群。当一个群不含不变真子群时，它就不可能再分解为较简单的群的直积，这样的群被称为单纯群（单群）。按此定义，一维李群是单李群；但不把它算作单李群更方便些，因此单李群的概念常是针对维数大于1的李群的。不含阿贝尔不变子群(只含单位元的子群除外）的群称为是半单纯（半单）的。显然，单群都是半单的；反之不然。

一个李群是单的充要条件为：它的李代数是单的。

一个李群是半单的充要条件为：它的李代数是半单的。

由上面的(5)又知：李群为半单的充要条件是，它可以分解为单李群的直积。这个表述对半单李群的概念刻画得更为明确。

(7) 李群的同构与同态

两个李群局部同构的充要条件是：它们的李代数同构；或者它们的结构常数相等。

G_2同态于G_1的充要条件是：G_2的李代数同态于G_1的李代数。事实上，若φ是由G_1的李代数到G_2的李代数的同态映射

$$v_1 \longrightarrow v_2 = \varphi(v_1)$$

则由φ可产生一个由G_1到G_2的同态映射

$$e^{v_1} \longrightarrow e^{v_2} = e^{\varphi(v_1)}$$

(由$\varphi([v_1, v_1'])=[\varphi(v_1), \varphi(v_1')]$和(4.12)易推断$e^{v_1}e^{v_1'} \longrightarrow e^{\varphi(v_1)}e^{\varphi(v_1')}$)；反之亦然。

(8) 李群的表示

通过指数映射(23.24)，李群的李代数的每个表示生成李群的一个表示，李群的每个表示也生成李代数的一个表示。即

李群的每个表示都能由李群的李代数的表示通过指数映射来生成。

李群的两个表示等价的充要条件是：生成这两个表示的李代数的两个表示等价。（注意有公式$S^{-1}e^{v}S=e^{S^{-1}vS}$）。

李群的表示不可约的充要条件是：生成它的李代数的表示是不可约的。注意算子 e^{v} 与 v 有共同的不变子空间。

以上论断表明：李群的全部不等价的不可约表示由李群的李代数的全部不等价的不可约表示生成。又，李群的表示与生成它的李代数的表示有共同的表示空间，所以两者的约化问题是相同的。这样，李群的表示论就被简化为它的李代数的表示论。

需强调指出，本小节中所讨论的李群与其李代数之间的关系都是局部的，所有的命题都是对局部李群成立的。例如，由同构的李代数生成的李群只是局部同构的，它们未必是全局同构的。这方面的熟知例子是$SO(3)$和$SU(2)$：二者的李代数分别由(4.8)中的三个3×3矩阵$\{I_1, I_2, I_3\}$和三个 2×2 的泡利矩阵$\{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3\}$张成，结构常数都是(23.30)。但这些局部同构的群有一个共同的通用复盖群（参看21.3小节）。在上面的例子中，$SU(2)$两次复盖$SO(3)$（参看§7）。

§24 半单李代数的分类

24.1 半单性的嘉当(Cartan)准则

从在物理学中应用的角度来看，可限于的半单群研究。在这一节中，将对半单李代数的结构和分类问题作比较系统但是粗略的讨论。这是建立李群李代数的表示理论所必备的基础。我们将尽量用初等的方式来陈述其中最有用的结果，这样就必须对论证的数学严谨性作出某些牺牲。关于这个问题的严格数学理论，可以在任何一本关于李代数的专著中找到[15]。

首先需要建立一个准则，用以判别任一李代数是否半单。嘉当首先给出了这样的准则，它可以用李代数的度规张量来表达。

李代数作为矢量空间，可以在其中引入标积运算（对称双线性型）

$$(v,u)=(v^\rho I_\rho, u^\sigma I_\sigma)$$

$$=(I_\rho, I_\sigma)v^\rho u^\sigma = g_{\rho\sigma}v^\rho u^\sigma \qquad (24.1)$$

$$g_{\rho\sigma}=(I_\rho, I_\sigma) \qquad (24.2)$$

在基矢（坐标）变换下，$g_{\rho\sigma}$ 是二阶对称的协变张量，标积当然是标量（不变量）。但这些说法只是形式上的，因为(24.2)尚无具体定义。（因为我们并不知道 I_ρ, I_σ的“长度”与“夹角”，实际上这正是待定义的）。这里留下了很大的任意性，我们进一步要求标积在保持对易子积的满秩线性变换（李代数的自同构映射）下不变。设$\hat{A}$ 是保持李代数的对易子积（即保持对易关系不变）的满秩线性变换，则有

$$[\hat{A}I_\rho, \hat{A}I_\lambda]=\hat{A}[I_\rho, I_\lambda]=c^\tau_{\rho\lambda}\hat{A}I_\tau$$

或用$\hat{A}$在基$\{I_\rho\}$下的矩阵($\hat{A}I_\rho = A^{\rho'}_\rho I_{\rho'}$)表示

$$A^{\rho'}_\rho A^{\lambda'}_\lambda c^{\tau}_{\rho'\lambda'} = c^{\tau'}_{\rho\lambda}A^{\tau}_{\tau'}$$

两边乘 A^{-1}，得

$$A^{\rho'}_\rho A^{\lambda'}_\lambda (A^{-1})^\mu_\tau c^\tau_{\rho'\lambda'} = c^\mu_{\rho\lambda}$$

类似地，有

$$A^{\sigma'}_\sigma A^{\mu'}_\mu (A^{-1})^\lambda_\nu c^\nu_{\sigma'\mu'} = c^\lambda_{\sigma\mu}$$

将以上两式相乘并对重复指标求和，得

$$(A^{\rho'}_\rho A^{\sigma'}_\sigma c^{\mu'}_{\rho'\lambda'} c^{\lambda'}_{\sigma'\mu'} = c^\mu_{\rho\lambda} c^\lambda_{\sigma\mu} \qquad (24.3)$$

又要求在这样的$\hat{A}$下，标积不变

$$(\hat{A}I_\rho, \hat{A}I_\sigma)=(I_\rho, I_\sigma)$$

或写为

$$A^{\rho'}_\rho A^{\sigma'}_\sigma g_{\rho'\sigma'} = g_{\rho\sigma} \qquad (24.4)$$

可见，只需令（定义）

$$g_{\rho\sigma}=c^{\mu}_{\rho\lambda}c^{\lambda}_{\sigma\mu} \tag{24.5}$$

就能满足：在满足(24.3)的任意变换 $\hat{A}$下，(24.4)都成立。这样我们就得到了李代数的度规张量的合理定义(24.5)，并由此最后确定了标积的定义。

若李代数不是半单的，即假定它有一个非零阿贝尔理想，我们用加撇的指标来标记这理想的基矢，则有(按(23.34))

$$c^{\lambda'}_{\sigma'\mu'}=0$$

和（按(23.32)）

$$c^{\lambda}_{\sigma'\mu}=0\ (\lambda\neq\lambda')$$

从而可得

$$g_{\rho\sigma'}=c^{\mu}_{\rho\lambda}c^{\lambda}_{\sigma'\mu}=c^{\mu}_{\rho\lambda'}c^{\lambda'}_{\sigma'\mu}=c^{\mu'}_{\rho\lambda'}c^{\lambda'}_{\sigma'\mu'}=0$$

这表明矩阵$(g_{\rho\sigma})$的σ'列为零。因而有

$$\det(g_{\rho\sigma})=0 \tag{24.6}$$

可见，上式是李代数为非半单的必要条件。所以，若有

$$\det(g_{\rho\sigma})\neq 0 \tag{24.7}$$

则李代数必为半单的。反之，能够证明[15]，若李代数为半单的，则有(24.7)。总之，李代数为半单的充要条件是：它的度规张量（24.5）满足非退化条件(24.7)。这个条件也就是双线性型(24.1)（也称李代数的Killing型）的非退化条件。

由条件(24.7)知，对半单李代数，矩阵$(g_{\rho\sigma})$有逆矩阵$(g^{\rho\sigma})$存在

$$g_{\rho\tau}g^{\tau\sigma}=\delta^{\sigma}_{\rho} \tag{24.8}$$

$g^{\tau\sigma}$称为度规张量的逆变分量。

对$SO(3)$的李代数$so(3)$，由(23.30)和(24.5)不难算出它的度规张量

$$g_{\rho\sigma}=-2\delta_{\rho\sigma} \tag{24.9}$$

$$\det(g_{\rho\sigma})=-8$$

可见 $SO(3)$和 $so(3)$是半单的。事实上，它们都是单的：若三维李代数 $so(3)$ 可以分解为一个一维理想和一个二维理想的直和，它本身就不是半单的了。三维的半单李代数只能是单的。

24.2 半单李代数的嘉当分解与标准基

由(4.8)给出的无穷小生成元$\{I_1, I_2, I_3\}$或由(23.11)给出的无穷小算子$\{\hat{I}_1,\hat{I}_2,\hat{I}_3\}$，可称为是李代数$so(3)$的自然基。在21.2 小节中推导 $so(3)$的不可约表示时，我们曾使用了另外一组基（即J_+, J_-, J_3)：

$$\{i(I_1+iI_2), i(I_1-iI_2), iI_3\}$$

可称为 $so(3)$ 的标准基。已经看到，在推导不可约表示时，利用标准基的对易关系（主要是前两个基矢对第三基矢的本征值的升降作用）是很方便的。这种情况在讨论一般半单李代数的不可约表示时也是存在的。所以需要建立一般半单李代数的标准基。

建立半单李代数的标准基的工作，可以从研究下列本征值问题着手。设$\mathscr{L}$为一半单的 n 维李代数，$\{I_\rho\}$为任意(自然)基。对$\mathscr{L}$的任意元A，可定义一个$\mathscr{L}$上的线性算子$\hat{A}$

$$\hat{A}X=[A,X], X\in\mathscr{L} \qquad (24.10)$$

对易子积的线性性保证了算子$\hat{A}$的线性性。由对易子积的性质3°不难验证，$\hat{A}$还满足

$$[A,A']\longrightarrow[\hat{A},\hat{A}'] \qquad (24.11)$$

($[[A,A'],X]=[A,[A',X]]-[A'[A,X]], X\in\mathscr{L}$) 可见 $\hat{A}$是A的同态象，$\{\hat{A}: A\in\mathscr{L}\}$是$\mathscr{L}$的同态象。所以$\{\hat{A}: A\in\mathscr{L}\}$是$\mathscr{L}$的一个表示，称为李代数$\mathscr{L}$的伴随表示。注意，伴随表示上移的表示空间就是$\mathscr{L}$本身。由李代数的伴随表示生成的李群的表示（表示空间也是$\mathscr{L}$）为

$$g=e^A\longrightarrow\hat{g}=e^{\hat{A}} \qquad (24.12)$$

$$\hat{g}X = e^{\hat{A}}X = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\hat{A}^k X$$

$$= X + \frac{1}{1!}[A, X] + \frac{1}{2!}[A, [A, X]] + \cdots$$

$$= e^A X e^{-A}$$

$$\hat{g}X = gXg^{-1}, \quad X \in \mathscr{L} \tag{24.13}$$

这个表示也称为李群的无穷小表示，其维数恰为群的维数。

回过来考虑下列本征值问题

$$\hat{A}X = \rho X \tag{24.14}$$

将$A = a^\mu I_\mu$和$X = x^\mu I_\mu$和(24.10)代入上式得

$$a^\mu x^\nu c^\tau_{\mu\nu} I_\tau = \rho x^\tau I_\tau$$

从而可将(24.14)写为

$$(a^\mu c^\tau_{\mu\nu} - \rho\delta^\tau_\nu)x^\nu = 0 \tag{24.15}$$

本征值的方程（上方程有非零解 x^ν 的条件）为

$$\det(a^\mu c^\tau_{\mu\nu} - \rho\delta^\tau_\nu) = 0 \tag{24.16}$$

由于属于$\hat{A}$的不同的本征值的本征矢是线性无关的，而所有本征值的重数（简并度）之和等于代数方程(24.16)的次数——$\mathscr{L}$的维数n，所以如能对$\hat{A}$的每个本征值确定个数等于其简并度的无关本征矢，则所有这些本征矢形成$\mathscr{L}$的一组基。但对一般的线性算子这并非总能办到，因为属于其m重本征值((24.15)的m重根）的独立本征矢可能小于m个。关于半单李代数$\mathscr{L}$的本征值问题(24.14)，嘉当指出[15]：当$A \in \mathscr{L}$选得使(24.16)具有最大数目的不同根时，(24.16)只有一个重根$\rho = 0$，属于此重根的独立本征矢的个数等于它的重数，这些本征矢作为$\mathscr{L}$

的元是互易的。这是关于半单李代数的结构的一条十分重要的定理。我们把嘉当定理的这种比较初等的表述作为本节的基础。

上述定理中的根 $\rho=0$的重数 l （使(24.16)有最大数目不同根的A一般不是唯一的，但这重数是相同的），称为李代数$\mathscr{L}$的秩。

按嘉当定理，每一个满足定理条件的算子 $\hat{A}$ 的本征函数（本征矢）的集合形成 $\mathscr{L}$ 的一组基，称为半单李代数的标准基，即嘉当——外尔(Weyl)基。在属于根 $\rho=0$ 的本征矢中任取 l 个线性无关的：$H_1, H_2, \cdots, H_l$；对每个非零根 $\rho=\alpha$，只有一个线性独立的本征矢，可任取一个记作E_α；共有$(n-l)$个不同的非零根 $\alpha, \beta, \cdots, \nu$，得出$(n-l)$个本征矢 $E_\alpha, E_\beta, \cdots, E_\nu$. 从而得到$\mathscr{L}$的一组标准基

$$\{H_1, H_2, \cdots, H_l, E_\alpha, E_\beta, \cdots, E_\nu\}$$

并有

$$\hat{A}H_i=[A, H_i]=0, \quad i=1, 2, \cdots, l \tag{24.17}$$

$$\hat{A}E_\alpha=[A, E_\alpha]=\alpha E_\alpha \quad (\alpha \text{ 取}(n-l)\text{个不同值}) \tag{24.18}$$

$$[H_i, H_j]=0 \tag{24.19}$$

由于$A\in\mathscr{L}$也是$\hat{A}$ 的属于 0 根的本征矢

$$\hat{A}A=[A, A]=0$$

它必为$\{H_i\}$ 的线性组合

$$A=a^iH_i \tag{24.20}$$

进一步分析标准基的性质。基矢E_α本来是用 $\hat{A}$ 的属于非零根 α 的本征矢来规定的，但嘉当定理还表明，这些基不但是 $\hat{A}$

的本征矢，而且还是算子组 $\hat{H}_1, \hat{H}_2, \cdots, \hat{H}_l$ 的共同本征矢。由对易子积的性质3°，有

$$[A[H_i, E_\alpha]] = -[H_i[E_\alpha, A]] - [E_\alpha, [A, H_i]]$$
$$= [H_i, [A, E_\alpha]] = \alpha[H_i, E_\alpha]$$

或写为

$$\hat{A}[H_i, E_\alpha] = \alpha[H_i, E_\alpha]$$

可见$[H_i, E_\alpha]$也是$\hat{A}$的属于根 α 的本征矢。按嘉当定理，α 是非重根，只有一个线性独立的本征矢；因而$[H_i, E_\alpha]$ 等于 E_α 乘以常数。从而得到

$$\hat{H}_i E_\alpha = [H_i, E_\alpha] = \alpha_i E_\alpha, \quad i = 1, 2, \cdots, l \tag{24.21}$$

这就证明了E_α是$\{\hat{H}_1, \hat{H}_2, \cdots, \hat{H}_l\}$的共同本征矢，所属的本征值为$(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_l)$。注意 l 个H_i是在 $\rho=0$的本征矢中任取的一组线性独立的本征矢，是$\mathscr{L}$的 l 维子空间（$\hat{A}$的属于$\rho=0$的本征子空间）$\mathscr{H} = \{H;\ H \in \mathscr{L}, \hat{A}H = 0\}$ 的一组基。对事先取定的$\hat{A}$，$\mathscr{H}$和$E_\alpha, E_\beta, \cdots$，（可差一常数因子）都是确定的，即根 $\alpha, \beta, \cdots$，是确定的，但$\mathscr{H}$的基$\{H_i\}$可以任意选取。对$\{H_i\}$的重新选择，相当于 $\mathscr{H}$ 中的基底变换，由(24.21)可看出，本征值$\{\alpha_i\}$将与$\{H_i\}$以同样方式变换（协变）。所以，对于$\mathscr{H}$的基底变换，本征值$(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_l)$乃是一个 l 维矢量的协变分量。这个 l 维矢量称为$\hat{\mathscr{H}} = \{\hat{H} : H \in \mathscr{H}\}$ 在$\mathscr{L}$中的根矢量或根。

以上的讨论表明，$\hat{A}$ 的每个根唯一地决定$\hat{\mathscr{H}}$ 的一个根矢量，反之亦然。事实上，由(24.18)、(24.20)和(24.21)可得出两者的关系

$$\alpha = a^i \alpha_i \tag{24.22}$$

这还表明对两者的线性运算也是相同的。所以今后所说的根，既可理解为$\hat{A}$的根α，也可理解为与α对应的$\hat{\mathscr{H}}$的根矢量，并且用同一符号α表示$\hat{\mathscr{H}}$的那个以$\{\alpha_i\}$为协变分量的根矢(根)。但要注意，在只对矢量才有意义的场合，如根的标积，就只能作后一种理解。

上面的结果又可归纳为如下命题：

半单李代数$\mathscr{L}$总可分解为子空间的直和

$$\mathscr{L}=\mathscr{H}\oplus\mathscr{E}^{(\alpha)}\oplus\mathscr{E}^{(\beta)}\oplus\cdots\oplus\mathscr{E}^{(\nu)} \tag{24.23}$$

其中$\mathscr{H}$是$\mathscr{L}$的一个极大可换子代数，称为嘉当子代数。$\hat{\mathscr{H}}=\{\hat{H}: H\in\mathscr{H}\}$在$\mathscr{L}$中的非零根$\alpha, \beta, \cdots, \nu$都是不简并的，相应的一维本征子空间为$\mathscr{E}^{(\alpha)}, \mathscr{E}^{(\beta)}, \cdots, \mathscr{E}^{(\nu)}$。嘉当子代数的维数就是李代数的秩（定义）。

$\mathscr{H}$本身正是$\hat{\mathscr{H}}$在$\mathscr{L}$中的零根的本征子空间。所以(24.23)乃是$\mathscr{L}$按$\hat{\mathscr{H}}$的根子空间的分解，称为半单李代数的嘉当分解（注意：其中的直和是空间的直和，不是李代数的直和）。

上面的命题实为嘉当定理的另一种表述形式，其中的$\mathscr{E}^{(\alpha)}$就是由E_α生成的一维空间。这种表述显然是更直接地揭示了事情的本质，缺点是没有同时给出实现分解——即定出嘉当子代数$\mathscr{H}$的具体方法，而前面的表述给出了这个方法。

例如对半单李代数$so(3)$，其自然基为$\{I_i\}$，对$A=a^iI_i\in so(3)$有（注意a的上标不是幂次）

$$\begin{cases}\hat{A}I_1=[A, I_1]=-a^2I_3+a^3I_2\\ \hat{A}I_2=[A, I_2]=a^1I_3-a^3I_1\\ \hat{A}I_3=[A, I_3]=-a^1I_2+a^2I_1\end{cases}$$

所以$\hat{A}$在自然基下的矩阵为

$$\begin{pmatrix} 0 & -a^3 & a^2 \\ a^3 & 0 & -a^1 \\ -a^2 & a^1 & 0 \end{pmatrix}$$

本征值方程(24.16)为

$$\begin{vmatrix} -\rho & -a^3 & a^2 \\ a^3 & -\rho & -a^1 \\ -a^2 & a^1 & -\rho \end{vmatrix} = \rho[\rho^2 + ((a^1)^2 + (a^2)^2 + (a^3)^2)] = 0$$

它最多有三个不同的根，有三个根的条件是a^1、a^2、a^3不全为零。可见，A取$so(3)$的任意非零元都满足嘉当定理的条件，例如可取$a^1 = a^2 = 0$，$a^3 = i$，即

$$A = iI_3$$

$\hat{A}$ 的三个根是

$$\rho = 0, 1, -1$$

相应的本征矢可取为（可差一常因子）

$$H_1 = I_3$$

$$E_1 = I_1 - iI_2$$

$$E_{-1} = I_1 + iI_2$$

这就是（或正比于）前面的J_+, J_-, J_3。$\rho = 0$也是非简并的，所以$so(3)$的秩$l = 1$，嘉当子代数$\mathscr{H}$由$H_1 = I_3$张成。

24.3 根的性质

上面的讨论表明，半单李代数的标准基（或它的嘉当分解）是依赖于上面所定义的根系的。后面我们还将进一步利用根系来将单和半单李代数分类。所以需要首先明了根的一些基本性质。

半单李代数的结构常数$c^{\lambda}_{\rho\sigma}$是三阶的混合张量，下标是协变指标，上标是逆变指标，通过度量张量（即度规张量）$g_{\lambda\tau}$可将它的上标降下来化为三阶协变张量

$$c_{\rho\sigma\tau}=c^{\lambda}_{\rho\sigma}g_{\lambda\tau} \tag{24.24}$$

由上式定义的张量与结构常数张量是一一对应的，因而称它为结构常数张量的协变分量。结构常数的基本性质（23.28）和(23.29)可用它的协变分量的对称性更简洁地表达出来。

$c^{\lambda}_{\rho\sigma}$ 对下标的反对称性相当于 $c_{\rho\sigma\tau}$ 对前两个指标的反对称性。由(23.28)和(23.29)又可写出

$$c^{\lambda}_{\rho\sigma}c^{\mu}_{\lambda\theta}=c^{\lambda}_{\sigma\theta}c^{\mu}_{\rho\lambda}-c^{\lambda}_{\rho\theta}c^{\mu}_{\sigma\lambda}$$

以$c^{\theta}_{\tau\mu}$乘上式并对重复指标求和，并将(24.24)和(24.5)代入左端，可得

$$c_{\sigma\rho\tau}=c^{\lambda}_{\sigma\theta}c^{\mu}_{\rho\lambda}c^{\theta}_{\tau\mu}-c^{\lambda}_{\rho\theta}c^{\mu}_{\sigma\lambda}c^{\theta}_{\tau\mu}$$

上式右端的两项在指标ρ、σ、τ的轮换下都不变，在指标的对换下两项互换。因而$c_{\rho\sigma\tau}$在指标轮换下不变，在指标对换下变号。或概括为：$c_{\rho\sigma\tau}$对任意两个指标都是反对称的。

考虑标积（设$\{I_{\sigma}\}$是$\mathscr{L}$的一组基）

$$([I_{\rho},I_{\sigma}],I_{\tau})=c^{\lambda}_{\rho\sigma}g_{\lambda\tau}=c_{\rho\sigma\tau}$$

$$(I_{\rho},[I_{\sigma},I_{\tau}])=c^{\lambda}_{\sigma\tau}g_{\rho\lambda}=c^{\lambda}_{\sigma\tau}g_{\lambda\rho}=c_{\sigma\tau\rho}$$

可见以上两个标积相等。由此可知有恒等式

$$([X,Y],Z)=(X,[Y,Z]) \qquad X,Y,Z\in\mathscr{L} \tag{24.25}$$

将此公式用于A,E_{α},E_{β}，可得

$$\begin{aligned}([A,E_{\alpha}],E_{\beta})&=(\hat{A}E_{\alpha},E_{\beta})=\alpha(E_{\alpha},E_{\beta})\\&=-([E_{\alpha},A],E_{\beta})=-(E_{\alpha},[A,E_{\beta}])\\&=-(E_{\alpha},\hat{A}E_{\beta})=-\beta(E_{\alpha},E_{\beta})\end{aligned}$$

或写为

$$(\alpha+\beta)(E_{\alpha},E_{\beta})=0 \tag{24.26}$$

由此得到关于标准基的一个正交性引理：

若α和β是根，且$(\alpha+\beta)\neq 0$，则有$(E_\alpha, E_\beta)=0$。

注意，上面的引理包含零根的情况在内，E_0表示$\mathscr{H}$中的任意元。

下面将逐步讨论根的一系列重要性质，最后将它们归纳为几条定理。

考虑根矢量的全体和由它们所张成的线性空间$\mathscr{B}$。为此，先来研究一下$\mathscr{L}$的度规张量$g_{\rho\sigma}$在子空间$\mathscr{H}$中的缩小g_{ij} $(i,j=1,2,\cdots,l)$。显然（在标准基下写出(24.2)）

$$g_{ij}=(H_i,\ H_j) \qquad (24.27)$$

是$\mathscr{H}$中的二阶对称协变张量，它决定着$\mathscr{H}$中矢量的标积。这个张量象$g_{\rho\sigma}$一样，也是非退化的，即有

$$\det(g_{ij})\neq 0 \qquad (24.28)$$

因为，若不是这样，方程组

$$g_{ij}x^j=0 \qquad i=1,2,\cdots,l$$

将有非零解$x^j=h^j$。从而有非零矢量$H_0=h^jH_j\in\mathscr{H}$，使

$$(H_i,H_0)=h^j(H_i,H_j)=g_{ij}h^j=0 \quad i=1,2,\cdots,l$$

这表明H_0与$\mathscr{H}$中的任意矢量H（H_i的线性组合）正交。特别地，可在$\mathscr{H}$中另取一组基$\{H'_i\}$，使$H'_1=H_0$，则有

$$(H'_i,H'_1)=0 \qquad i=1,2,\cdots,l$$

又由正交性引理$(\alpha+0=\alpha\neq 0)$

$$(E_\alpha,\ H'_1)=0$$

用$\mathscr{L}$中的度规张量在标准基$\{H'_i;\ E_\alpha\}$下的分量来表示以上两式

$$g_{i1}=0,\quad g_{\alpha 1}=0$$

或并为

$$g_{\rho 1}=0$$

这表明矩阵$(g_{\rho\sigma})$的第一列为零，从而$\det(g_{\rho\sigma})=0$。这与$\mathscr{L}$

的半单性条件相抵。

另一方面，又可以用根矢量的协变分量来表示张量g_{ij}. 由度规张量的定义(24.21)有

$$g_{ij}=\sum_{\alpha\alpha'} c_{i\ \alpha}^{\alpha'} c_{j\ \alpha'}^{\alpha}+c_{i\ l}^{k} c_{j\ k}^{l}$$

这是在$\mathscr{L}$的标准基下写出的，其中的α、α'是非零根，同时作为基矢E_α、$E_{\alpha'}$的标记，因而也是结构常数和度规张量的指标，对它们不采用暗和约定；而i、j、k、$l=1,2,\cdots,l$是基矢H_i等的次序指标，同时也作为结构常数和度规张量的指标，对它们仍取暗和约定。一般符号ρ、σ、τ、λ等，既可表α也可表i，对它们是取暗和约定的。由(24.19)和(24.21)知

$$c_{i\ j}^{\tau}=0 \qquad c_{i\ \alpha}^{\alpha'}=\alpha_i\delta_\alpha^{\alpha'} \tag{24.29}$$

代入上面g_{ij}的式子，得出

$$g_{ij}=\sum_\alpha \alpha_i\alpha_j=\alpha_i\alpha_j+\beta_i\beta_j+\cdots+\nu_i\nu_j \tag{24.30}$$

$\det(g_{ij})\neq0$表明，矩阵(g_{ij})的列矢量（或行矢量）是线性无关的；又由(24.30)可见，这l个独立列矢量的每一个，都是下列列矢量的线性组合

$$\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\\ \vdots\\ \alpha_l\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}\beta_1\\ \beta_2\\ \vdots\\ \beta_l\end{pmatrix},\cdots\cdots,\begin{pmatrix}\nu_1\\ \nu_2\\ \vdots\\ \nu_l\end{pmatrix}$$

因而所列的$(n-l)$个矢量中，至少有l个线性无关的。但l维矢量最多有l个线性无关的，故以上所列矢量中恰有l个线性无关的。这就证明了，线性独立的根的数目等于$\mathscr{L}$的秩l。任意一组l个独立根可取作$\mathscr{R}$的基，这时$\mathscr{R}$中的每个矢量，特别是每个根，都可写成这组独立根的线性组合。

注意到(24.29)中的α_i是$\mathscr{R}$中的矢量α的协变分量，便可看出，g_{ij}是$\mathscr{R}$中的二阶对称张量的协变分量，而且是非退化的。可以把这个张量取作空间$\mathscr{R}$的度规张量。$\mathscr{R}$中任二矢量x

和 y 的标积为

$$(x,y)=x_iy^i=g_{ij}x^iy^j \tag{24.31}$$

度规张量的逆变分量g^{ij}由(g_{ij})的逆矩阵来定义

$$g_{il}g^{lj}=\delta_i^j \tag{24.32}$$

总之，根矢（$(n-l)$个）的集合张成一个带有度规(24.30)和标积(24.31)的 l 维线性空间$\mathscr{R}$。

根是以$\pm\alpha$的形式成对出现的，即：若α是根，则$(-\alpha)$也是根。否则，若α是一非零根，而$(-\alpha)$不是根，则对所有的根β有$(\alpha+\beta)\neq 0$。由正交性引理，这将导致$(E_\alpha,H_i)=g_{\alpha i}=0$，$(E_\alpha,E_\beta)=g_{\alpha\beta}=0$（$\beta$取遍非零根）。这意味着$\mathscr{L}$的度规张量$(g_{\rho\alpha})$中以$\alpha$为标记的一行为零，因而有$\det(g_{\rho\sigma})=0$，这与$\mathscr{L}$的半单性相抵。于是标准基矢$E_\alpha$和$E_{-\alpha}$也必成对出现，并且$(E_\alpha,E_{-\alpha})\neq 0$（否则$E_\alpha$又将正交于所有标准基）。利用这一点能使带有任意常因子的$\{E_\alpha\}$适当的规范化

$$(E_\alpha,E_{-\alpha})=g_{\alpha,-\alpha}=1 \tag{24.33}$$

在此限制下，当E_α取定后（常因子仍可任取），$E_{-\alpha}$就唯一确定了。注意$(\alpha+\alpha)=2\alpha\neq 0\Rightarrow(E_\alpha,E_\alpha)=0$，因而$E_\alpha$不能用$(E_\alpha,E_\alpha)=1$来归一化。

由恒等式

$$[A,[E_\alpha,E_\beta]]+[E_\alpha,[E_\beta,A]]+[E_\beta,[A,E_\alpha]]=0$$

和(24.18)可得

$$\hat{A}[E_\alpha,E_\beta]=[A,[E_\alpha,E_\beta]]=(\alpha+\beta)[E_\alpha,E_\beta] \tag{24.34}$$

当$\beta=-\alpha$时，$(\alpha+\beta)$是零根，上式表明$[E_\alpha,E_{-\alpha}]$是属于$\rho=0$的本征矢，因而可写为$\{H_i\}$的组合

$$[E_\alpha,E_{-\alpha}]=c^i_{\alpha,-\alpha}H_i \tag{24.35}$$

又利用(24.24)、(24.29)和(24.33)，可得

$$c^i_{\alpha,-\alpha}=g^{ik}c_{\alpha,-\alpha,k}=g^{ik}c_{k,\alpha,-\alpha}=g^{ik}c^\tau_{k\alpha}g_{\tau-\alpha}$$

$$=g^{ik}\alpha_k\delta^{\tau}_{\alpha}g_{\tau-\alpha}=\alpha^i g_{\alpha-\alpha}=\alpha^i \qquad (24.36)$$

从而(24.35)又能写为

$$[E_\alpha, E_{-\alpha}]=\alpha^i H_i \qquad (24.37)$$

当$(\alpha+\beta)$是非零根时，(24.34)表明$[E_\alpha,\ E_\beta]$是属于$(\alpha+\beta)$的本征矢，因而正比于标准基矢$E_{\alpha+\beta}$；当$(\alpha+\beta)$不是根时，$[E_\alpha,\ E_\beta]$必为零（否则按定义，(24.34)表明$(\alpha+\beta)$是根）。总之有

$$\hat{E}_\alpha E_\beta=[E_\alpha,\ E_\beta]=\begin{cases}N_{\alpha\beta}E_{\alpha+\beta}, & \text{当}(\alpha+\beta)\neq 0\text{是根}\\ 0, & \text{当}(\alpha+\beta)\text{不是根}\end{cases} \qquad (24.38)$$

按(24.11)（$\mathscr{L}$的伴随表示），由(24.37)又可得出相应的算子的对易关系

$$[\hat{E}_\alpha,\ \hat{E}_{-\alpha}]=\alpha^i\hat{H}_i \qquad (24.39)$$

利用(24.38)和(24.39)还可导出根的另一些重要性质。

设β和$\alpha(\alpha\neq 0)$是两个根，则如前述，$(-\alpha)$也是一个根，因而在标准基中有E_β，E_α，$E_{-\alpha}$。将算子$\hat{E}_\alpha, \hat{E}^2_\alpha, \cdots$，及$\hat{E}_{-\alpha}$，$\hat{E}^2_{-\alpha}, \cdots$，作用于基矢$E_\beta$，按(24.38)，得到一个基矢叙列。但此叙列是有限的（根的个数有限），必在某处结束，故可写为（差一常数因子）

$$E_{\beta-p\alpha},\ E_{\beta-(p-1)\alpha},\ \cdots,\ E_\beta,\ E_{\beta+\alpha},\ \cdots,\ E_{\beta+q\alpha} \qquad (24.40)$$

其中p、q是两个非负整数，$\beta-(p+1)\alpha$和$\beta+(q+1)\alpha$不再是根，因而有

$$\hat{E}_{-\alpha}E_{\beta-p\alpha}=0 \qquad (24.41)$$

$$\hat{E}_\alpha E_{\beta+q\alpha}=0 \qquad (24.42)$$

与(24.40)相应的根的叙列为

$$\beta-p\alpha,\beta-(p-1)\alpha,\cdots,\beta,\beta+\alpha,\cdots,\beta+q\alpha \qquad (24.43)$$

称为β的α根列。

由(24.38)、(24.41)和(24.42)容易看出，由基矢叙列(24.40)张成的子空间在$\hat{E}_\alpha$和$\hat{E}_{-\alpha}$下不变，因而也在$[\hat{E}_\alpha,\hat{E}_{-\alpha}]$下不变。我们来计算算子$[\hat{E}_\alpha, \hat{E}_{-\alpha}]$在这个不变子空间上的迹。由于$\mathrm{tr}(\hat{E}_\alpha\hat{E}_{-\alpha})=\mathrm{tr}(\hat{E}_{-\alpha}E_\alpha)$，这个迹总为零。另一方面，由(24.39)，并利用$\hat{H}_iE_\gamma=[H_i, E_\gamma]=\gamma_iE_\gamma$，可在基(24.40)下算出$\alpha^i\hat{H}_i$的迹。从而得到

$$\sum_{k=-p}^{q}(\alpha,\beta+k\alpha)=0$$

有结果

$$(\alpha,\beta)=\frac{p-q}{2}(\alpha,\alpha) \tag{24.44}$$

上式要求

$$(\alpha,\alpha)\neq 0 \tag{24.45}$$

即任何非零根的自标积不等于零。这是因为，若$(\alpha,\alpha)=0$，则有$(\alpha,\beta)=0$，即α正交于所有的根。在$\mathscr{R}$中取一组独立的根$\alpha(1),\alpha(2),\cdots,\alpha(l)$作基，并使$\alpha(1)=\alpha$，在此基下写出度规张量

$$g_{ij}=(\alpha(i),\alpha(j))$$

则有$g_{i1}=(\alpha(i),\alpha)=0$，所以$\det(g_{ij})=0$。这与已证明了的(24.28)相抵，故(24.45)必须成立。于是(24.44)又能写为

$$\frac{2(\alpha,\beta)}{(\alpha,\alpha)}=p-q \tag{24.46}$$

由于$-p\leqslant-(p-q)\leqslant q$，$\beta-(p-q)\alpha$必在$\beta$的$\alpha$根列(24.43)中出现。这就证明了，若$\beta,\alpha(\alpha\neq0)$是根，则$\beta-[2(\alpha,\beta)/(\alpha,\alpha)]\alpha$也是根，并且$2(\alpha,\beta)/(\alpha,\alpha)$是一整数。

我们再来证明：在如上产生的β的α根列中已经包含了全部可以写成$\beta+k\alpha$（k为整数）形式的根。换言之，当$k<-p$或

$k>q$时，$\beta+k\alpha$不是根。假如$\beta+k_0\alpha$是根，$k_0>(q+1)$（注意$\beta+(q+1)\alpha$不是根），则从根$\beta_0=\beta+k_0\alpha$出发用同样的方法可产生一个β_0的α根列。设此根列的两端为$\beta_0-p_0\alpha=\beta+(k_0-p_0)\alpha$和$\beta_0+q_0\alpha=\beta+(k_0+q_0)\alpha$（$p_0$和$q_0$也是非负整数），则必有$k_0-p_0>q+1$。按(24.46)，对$\beta_0$的$\alpha$根列应有

$$\frac{2(\alpha,\beta_0)}{(\alpha,\alpha)}=p_0-q_0$$

另一方面

$$\frac{2(\alpha,\beta_0)}{(\alpha,\alpha)}=\frac{2(\alpha,\beta)}{(\alpha,\alpha)}+2k_0=p-q+2k_0$$

由以上两式得

$$k_0-p_0=q-p-q_0-k_0$$

这显然与$k_0-p_0>q+1$的要求相抵，因而$\beta+k_0\alpha$不可能是根。同样可证，$\beta+k_1\alpha(k_1<-(p+1))$也不可能是根。

将以上结果用于$\beta=0$的α根列。由于2α不是根（证明见下面的讨论），这个根列只含有三个根

$$-\alpha,0,\alpha$$

由此又知：若α是根，则可写为α的整数倍的根只有$0,\pm\alpha$。

将(24.39)作用于基矢叙列(24.40)中的$E_{\beta+k\alpha}$ $(-p<k<q)$和$E_{\beta+q\alpha}$，注意到(24.38)、(24.42)以及(24.21)，可得

$$M_q=(\alpha,\beta)+q(\alpha,\alpha)$$

$$M_k-M_{k+1}=(\alpha,\beta)+k(\alpha,\alpha)\qquad(-p<k<q)$$

其中

$$M_k=N_{\alpha,\beta+(k-1)\alpha}N_{-\alpha,\beta+k\alpha}\tag{24.47}$$

由以上两式又可解出

$$M_{k_0}=\sum_{k=k_0}^{q-1}(M_k-M_{k+1})+M_q$$

$$=\sum_{k=k_0}^{q}[(\alpha,\beta)+k(\alpha,\alpha)]$$

$$=(q-k_0+1)(\alpha,\beta)$$

$$+\frac{1}{2}(q-k_0+1)(q+k_0)(\alpha,\alpha)$$

以(24.44)代入，得

$$M_{k_0}=\frac{1}{2}(q-k_0+1)(p+k_0)(\alpha,\alpha) \tag{24.48}$$

在上式中取$k_0=1$，M_1用(24.47)代入，又得

$$N_{\alpha,\beta}N_{-\alpha,\beta+\alpha}=\frac{q(p+1)}{2}(\alpha,\alpha) \tag{24.49}$$

若$(\alpha+\beta)\neq0$是根，则$q\geqslant1$；又$p\geqslant0$，$(\alpha,\alpha)\neq0$，故(24.49)不等于零。由此推知

$$N_{\alpha,\beta}\neq0, \text{当}(\alpha+\beta)\neq0\text{是根} \tag{24.50}$$

将这一结果用于$\beta=\alpha$的情况：$[E_\alpha,E_\alpha]=0\Rightarrow N_{\alpha,\alpha}=0$。由此推断，$(\alpha+\alpha)=2\alpha$不是根。

现在取l个线性独立的根$\alpha(1),\alpha(2),\cdots,\alpha(l)$作为$l$维空间$\mathscr{R}$的基，则任意根$\beta$可写为

$$\beta=\sum_{k=1}^{l}b_k\alpha(k)$$

以$\alpha(i)$标乘上式并除以$(\alpha(i),\alpha(i))/2$（已证它不为零），得到

$$\frac{2(\beta,\alpha(i))}{(\alpha(i),\alpha(i))}=\sum_{k=1}^{l}b_k\frac{2(\alpha(k),\alpha(i))}{(\alpha(i),\alpha(i))},\quad i=1,2,\cdots,l$$

将上式看作是关于β的协变分量b_k的方程组，由上面已证明的基本事实知，这组方程中的所有系数都是整数，因而它的唯一解$\{b_k\}$是有理数（可以调整$\alpha(i)$中的常因子，使$(\alpha(i),\alpha(i))=1$，而$g_{ki}=(\alpha(k),\alpha(i))$是非退化的，故方程组有唯一解）。这就证明了，在适当的基下，所有的根的协变分量都是实数（有理数）。或者说，在$\mathscr{H}$的基$\{H_i\}$适当地选定后，所有的根α_i（即H_i的本征值）都是实的（注意：由于$\alpha=\alpha^i\alpha_i$中的α^i（$\hat{A}$

的分量)不一定是实的，故不能说在(24.22)意义下的标量α也是实的；但可以说根矢量α是实的）。这里对空间$\mathscr{R}$加上一条限制：定义$\mathscr{R}$由根矢的所有实系数的线性组合构成。这并不影响前面对$\mathscr{R}$所进行的讨论，全部结论仍应有效。于是，$\mathscr{R}$是一个l维实线性空间（系数域为实数域，在运算中所出现的所有数，如线性变换的矩阵元，矢量的分量，等等，全是实的；而矢量本身可以是抽象的）。$\mathscr{R}$的度规张量(24.30)显然也是实的，并且对任意$x\in\mathscr{R}$有

$$(x,x)=g_{ij}x^ix^j=\sum_\alpha(\alpha,x)^2\geqslant 0 \tag{24.51}$$

上式中的等号显然只在$x=0$时成立。因而又进一步知：对于所引入的度量，$\mathscr{R}$成为一个l维的实欧氏空间。这样一来，根系作为$\mathscr{R}$的有限矢量组，就可以用我们所习惯的欧氏几何来处理了。

假定α和β是任意两个非零根，以φ表示两者的夹角，则由基本关系(24.46)有

$$(\alpha,\beta)=\frac{1}{2}m\,(\alpha,\alpha)=\frac{1}{2}n(\beta,\beta)$$

其中m和n是两个整数。由此可得

$$\cos\varphi=\frac{(\alpha,\beta)}{\sqrt{(\alpha,\alpha)\,(\beta,\beta)}}=\pm\frac{\sqrt{m\,n}}{2}$$

$$\frac{\sqrt{(\beta,\beta)}}{\sqrt{(\alpha,\alpha)}}=\sqrt{\frac{m}{n}}$$

令$r=mn$，则因$\cos^2\varphi=r/4$不大于1，只能有

$$r=0,1,2,3,4 \tag{24.52}$$

假定β是α和β当中较长的矢量($(\beta,\beta)\geqslant(\alpha,\alpha)$)，则$\frac{m}{n}=\frac{r}{n^2}\geqslant 1$。故当$r=1,2,3$时，只能有$n=1$（$r=0$时，$n=0$）；当$r=4$

时可有$n=1$，2。但$r=4, n=1$的情况对应于$\beta=\pm 2\alpha$，已证明这是不可能的，故只有$r=4$，$n=2$这一种可能。总之，任二非零根的夹角和长度比的可能值为

$$\cos\varphi=\pm\frac{\sqrt{r}}{2} \tag{24.53}$$

$$\frac{\sqrt{(\beta,\beta)}}{\sqrt{(\alpha,\alpha)}}=\begin{cases}\sqrt{r}, & \text{当} r=1,2,3\\ 1 & ,\text{当} r=4\end{cases} \tag{24.54}$$

最后我们把上面得到的关于根的性质的主要结果写成如下定理，这些定理都是对半单李代数而言的。

定理1 根的集合张成一个l维的实欧氏空间（l是李代数的秩）。

定理2 若α是一非零根，则$(-\alpha)$也是根，但$\pm 2\alpha, \pm 3\alpha, \cdots$，都不是根。

定理3 若β和$\alpha(\neq 0)$是根，则$2(\alpha,\beta)/(\alpha,\alpha)$是整数，而且$\beta-[2(\alpha,\beta)/(\alpha,\alpha)]\alpha$是根。

定理4 任二非零根的夹角φ和长度比η只能取下列数值

$$\cos\varphi=\pm\sqrt{r}/2 \quad r=0,1,2,3,4$$

$$\eta=\begin{cases}\sqrt{r}, & \text{当} r=1,2,3\\ 1 & ,\text{当} r=4\end{cases}$$

24.4 标准基的对易式 结构常数

在前面的讨论中，已经求得（并利用）了半单李代数的标准基$\{H_1,H_2,\cdots,H_l;\ E_\alpha,E_\beta,\cdots,E_\nu\}$的对易关系，现将它们集中罗列于下

$$\begin{cases}[H_i,H_j]=0 \quad (i,j=1,2,\cdots,l)\\ [H_i,E_\alpha]=\alpha_i E_\alpha\\ [E_\alpha,E_{-\alpha}]=\alpha^i H_i\\ [E_\alpha,E_\beta]=\begin{cases}N_{\alpha\beta}E_{\alpha+\beta}, & \text{当}(\alpha+\beta)\text{是非零根}\\ 0 & ,\text{当}(\alpha+\beta)\text{不是根}\end{cases}\end{cases} \tag{24.55}$$

与此相应的，在标准基下，半单李代数的结构常数有公式

$$
\begin{cases}
c^{\tau}_{i\,j}=0 \\
c^{\tau}_{i\,\alpha}=\alpha_i\delta^{\tau}_{\alpha} \\
c^{\tau}_{\alpha,-\alpha}=\begin{cases}\alpha^i, & \tau=i \\ 0, & \tau=\beta\end{cases} \\
c^{\tau}_{\alpha\beta}=\begin{cases}N_{\alpha\beta}, & \tau=\alpha+\beta \\ 0, & \tau\neq\alpha+\beta\end{cases}
\end{cases}
\tag{24.56}
$$

在以上的对易式和结构常数中，除$N_{\alpha\beta}$外，都是由根的分量明显给定的。实际上$N_{\alpha\beta}$也是由根α和β的信息决定的，下面的工作就是要导出这个关系的明显表达式。

规范化条件(24.33)不足以完全确定标准基E_α，例如$E'_\alpha=\lambda_\alpha E_\alpha$也可满足$(E'_\alpha,E'_{-\alpha})=1$，只需令$\lambda_\alpha\lambda_{-\alpha}=1$。所以满足归范条件(24.33)的标准基矢的不确定性，是可以差一个满足以下条件的常数因子λ_α

$$\lambda_\alpha\lambda_{-\alpha}=1 \tag{24.57}$$

到目前为止，这个λ_α还是可以选择的。这一任意性，也表现在结构常数$N_{\alpha\beta}$中。由(24.55)容易看出，对于基$E'_\alpha=\lambda_\alpha E_\alpha$，常数$N'_{\alpha\beta}$为

$$N'_{\alpha\beta}=\frac{\lambda_\alpha\lambda_\beta}{\lambda_{\alpha+\beta}}N_{\alpha\beta} \tag{24.58}$$

即当E_α乘以λ_α时，$N_{\alpha\beta}$要乘以$\lambda_\alpha\lambda_\beta/\lambda_{\alpha+\beta}$. 因而通过调整$\lambda_\alpha$可以适当归范$N_{\alpha\beta}$.

对根系$\{\alpha\}$作如下变换

$$\alpha\longrightarrow\alpha'=-\alpha \tag{24.59}$$

由于根是以$\pm\alpha$的形式成对出现的，所以在变换(24.59)下，根系是不变的。因此，基$\{-E_{\alpha'}\}$的对易式应与基$\{E'_\alpha=\lambda_\alpha E_\alpha\}$的对易式相同（结构相同），$\lambda_\alpha$是满足(24.57)的常数（注意已不能任选）。由

$$[-E_{\alpha'},-E_{\beta'}]=(-N_{\alpha'\beta'})(-E_{\alpha'+\beta'})$$

$$[E'_{\alpha},E'_{\beta}]=\frac{\lambda_\alpha\lambda_\beta}{\lambda_{\alpha+\beta}}N_{\alpha\beta}E'_{\alpha+\beta}$$

得到

$$-N_{-\alpha,-\beta}=\frac{\lambda_\alpha\lambda_\beta}{\lambda_{\alpha+\beta}}\cdot N_{\alpha,\beta} \qquad (24.60)$$

令$\widetilde{\lambda_\alpha}=\sqrt{\lambda_\alpha}$，则有 $(\widetilde{\lambda}_\alpha\widetilde{\lambda}_{-\alpha})^2=\lambda_\alpha\lambda_{-\alpha}=1$。取$\widetilde{\lambda}_\alpha\widetilde{\lambda}_{-\alpha}=1$，则基矢（属于根$\alpha$的）$\widetilde{E}_\alpha=\widetilde{\lambda}_\alpha E_\alpha$仍满足归范化条件(24.33)。与$\widetilde{E}_\alpha$相应的$\widetilde{N}_{\alpha\beta}$为

$$\widetilde{N}_{\alpha\beta}=\frac{\widetilde{\lambda}_\alpha\widetilde{\lambda}_\beta}{\widetilde{\lambda}_{\alpha+\beta}}N_{\alpha\beta}$$

代入(24.60)得

$$\widetilde{N}_{\alpha\beta}=-\frac{\widetilde{\lambda}_\alpha\widetilde{\lambda}_\beta}{\widetilde{\lambda}_{\alpha+\beta}}\cdot\frac{\lambda_{\alpha+\beta}}{\lambda_\alpha\lambda_\beta}N_{-\alpha,-\beta}$$

$$=-\frac{\widetilde{\lambda}_{\alpha+\beta}}{\widetilde{\lambda}_\alpha\widetilde{\lambda}_\beta}N_{-\alpha,-\beta}=-\frac{\widetilde{\lambda}_{-\alpha}\widetilde{\lambda}_{-\beta}}{\widetilde{\lambda}_{(-\alpha-\beta)}}N_{-\alpha,-\beta}$$

$$=-\widetilde{N}_{-\alpha,-\beta}$$

这就证明了，通过调整待定常数的办法，总可选出属于根α的基矢E_α，它满足条件(24.33)，并使结构常数具有如下性质

$$N_{\alpha\beta}=-N_{-\alpha,-\beta} \qquad (24.61)$$

另一方面，利用公式(24.25)，有恒等式

$$([E_{-\alpha},E_{-\beta}],E_{\alpha+\beta})=([E_{\alpha+\beta},E_{-\alpha}],E_{-\beta})$$

其中$[E_{-\alpha},\ E_{-\beta}]=N_{-\alpha,-\beta}E_{-(\alpha+\beta)}$，$[E_{\alpha+\beta},\ E_{-\alpha}]=-[E_{-\alpha},\ E_{\alpha+\beta}]=-N_{-\alpha,\alpha+\beta}E_\beta$，代入上式化为

$$N_{-\alpha,-\beta}(E_{-(\alpha+\beta)},\ E_{(\alpha+\beta)})=-N_{-\alpha,\alpha+\beta}(E_\beta,\ E_{-\beta})$$

但在归范条件(24.33)下，上式中的标积都等于1，从而有

$$N_{-\alpha,-\beta}=-N_{-\alpha,\alpha+\beta} \tag{24.62}$$

总之，在适当的归范基下，结构常数$N_{\alpha,\beta}$有性质

$$N_{\alpha,\beta}=-N_{\beta,\alpha}=-N_{-\alpha,-\beta}=N_{-\alpha,\alpha+\beta} \tag{24.63}$$

最后，利用这一结果可将(24.49)写为

$$(N_{\alpha,\beta})^2=\frac{q(p+1)}{2}(\alpha,\alpha) \tag{24.64}$$

或解出

$$N_{\alpha,\beta}=\pm\left[\frac{q(p+1)}{2}(\alpha,\alpha)\right]^{1/2} \tag{24.65}$$

其中各个$N_{\alpha,\beta}$的符号的取法应由(24.63)限定；而p和q分别为使$\beta-p\alpha$和$\beta+q\alpha$是根的最大非负整数。当根系已知时，p和q容易由根α和β定出，从而由(24.65)便可算出结构常数$N_{\alpha\beta}$。

24.5 根图与分类

前面的结果表明，半单李代数的结构常数可由它的根系完全决定。从而不难理解：有相同的根系的两个半单李代数必同构；反之亦然。如果两个根系通过空间$\mathscr{R}$中的旋转或反演操作可以重合，则二者可被认为是本质上相同的，因为它们的差别可通过坐标系的不同取法来抵消，而李代数的结构是与$\mathscr{R}$内坐标系的取法无关的。这样的两个根系可称为是合同的。使用合同一词，可把上面的结论更准确地表为：两个半单李代数同构的充要条件是它们的根系合同。这样，我们就能将半单李代数的分类问题归结为将它们的根系分类的问题。如果能够作出所有不同（不合同）的根系，即可算出相应的结构常数（24.4节），从而就得到了半单李代数的一切可能的同构类型。

范·德·瓦尔登(B.L.Van der Waerden) 给出一种图解方法，通过作出一切可能的根向量图实现了完全的分类。这种方法的依据，是关于根的性质的四条定理（24.3小节）对根系所加的限制。下面扼要地介绍一下这种方法。

（1） 1秩半单李代数

这时根系张成1维空间，只有一个线性独立的根。设α是一根，则其余的根β必与α共线，有$\cos\varphi=\pm1$。由(24.53)，$r=4$，由(24.54)，$(\beta,\beta)=(\alpha,\alpha)$。所以，$\beta=\pm\alpha$，即根系由两个非零根$\alpha$和$-\alpha$组成，根矢图如图24.1示。可见1秩的半单李代数只有1个同构类型，通常记作A_1。由(24.51)得

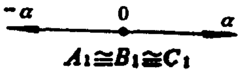


图24.1　1秩李代数的根图

$$(\alpha,\alpha)=(\alpha,\alpha)^2+(\alpha,-\alpha)^2=2(\alpha,\alpha)^2$$

$$(\alpha,\alpha)=\frac{1}{2}\quad 或\quad \sqrt{(\alpha,\alpha)}=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

这类李代数的标准基可写为$\{H,E_\alpha,E_{-\alpha}\}$，其对易关系（结构常数）可由24.4小节中的式子得出

$$\begin{cases}[H_1,E_\alpha]=\dfrac{1}{\sqrt{2}}E_\alpha\\[2ex] [H_1,\ E_{-\alpha}]=-\dfrac{1}{\sqrt{2}}E_{-\alpha}\\[2ex] [E_\alpha,E_{-\alpha}]=\dfrac{1}{\sqrt{2}}H_1\end{cases}\tag{24.66}$$

属于A_1型的熟知的李代数有so(3)和su(2)

（2） 2秩半单李代数

这时根系张成一个2维欧氏空间（平面），有两个线性独立的根（平面矢量）α和β（设$(\alpha,\alpha)\leqslant(\beta,\beta)$，且$\alpha$和$\beta$是相邻的）。按关于根的性质的定理4，二者的夹角和长度比只能取以下4组(φ,η)值

$(30°,\ \sqrt{3})$，$(45°,\sqrt{2})$，$(60°,1)$，$(90°$，不定)，

$2(\alpha,\beta)/(\alpha,\alpha)$和$2(\alpha,\beta)/(\beta,\beta)$的相应值为

3，2，1，0和1，1，1，0

由α和β出发，应用定理2和定理3便可生成一组根。这组根中，任二相邻根的夹角都等于α和β的夹角，因而无法再插入新的根，从而知生成的是整个根系。四种情况下的根图如图24.2所示。

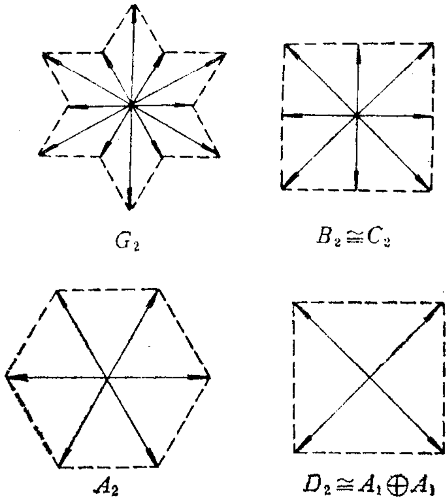


图24.2　2秩李代数的根图

2秩的半单李代数只有这四种不同的同构类型。它们的维数分别为：14，10，8，6。

可以证明，若一半单李代数的根系由两个互相正交的子根系组成，则这个李代数等于以两个子系为根系的子代数的直和；反之亦真[15]。

由以上这一命题即可看出，A_1、G_2、B_2、A_2都是单的；而D_2不是单的，它是两个单代数A_1与A_1的直和。

因半单李代数都是由单李代数的直和构成的，半单李代数的分类问题实际上可归结为单李代数的分类。在作单李代数的

根图时，可只考虑那种不能分为两个正交部分的图形。

下面以A_2为例，由根系作出李代数的结构。

由(24.51)可算出根矢的长度$\sqrt{(\alpha,\alpha)}=1/\sqrt{3}$，在下图所示的坐标系下，六个根矢的坐标可写为（只写出三个，见图24.3）

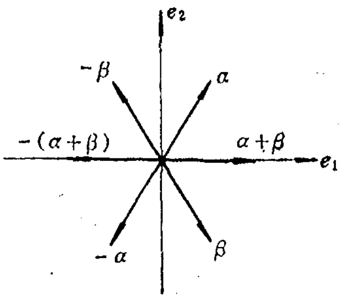


图24.3　A_2的根

$$
\begin{aligned}
\alpha &= \frac{1}{2\sqrt{3}}\ (1,\sqrt{3})\\
\beta &= \frac{1}{2\sqrt{3}}(1,-\sqrt{3})\\
\alpha+\beta &= \frac{1}{\sqrt{3}}(1,0)
\end{aligned}
\tag{24.67}
$$

A_2的标准基为$\{H_1, H_2, E_\alpha, E_{-\alpha}, E_\beta, E_{-\beta}, E_{(\alpha+\beta)}, E_{-(\alpha+\beta)}\}$，由(24.65)和(24.63)可写出结构常数$N_{\alpha,\beta}$等。对$\alpha$和$\beta$，有$p=0, q=1$，从而得

$$N_{\alpha,\beta}=\frac{1}{\sqrt{6}}$$

上式中对(24.65)取了正号，其他常数的符号应由(24.63)限定，有

$$N_{\alpha,-\alpha-\beta}=-N_{-\alpha,\alpha+\beta}=-N_{\alpha,\beta}=-\frac{1}{\sqrt{6}}$$

$$N_{\beta,-\alpha-\beta}=-N_{-\beta,\alpha+\beta}=-N_{\beta,\alpha}=N_{\alpha,\beta}=\frac{1}{\sqrt{6}}$$

$$N_{-\alpha,-\beta}=-N_{\alpha,\beta}=-\frac{1}{\sqrt{6}}$$

于是A_2的标准基的对易式可写为

$$
\left\{
\begin{aligned}
&[H_i, H_j]=0, \quad i,j=1,2\\
&[H_1, E_{\pm\alpha}]=\pm\frac{1}{2\sqrt{3}}E_{\pm\alpha}\\
&[H_1, E_{\pm\beta}]=\pm\frac{1}{2\sqrt{3}}E_{\pm\beta}\\
&[H_1, E_{\pm(\alpha+\beta)}]=\frac{1}{\sqrt{3}}E_{\pm(\alpha+\beta)}\\
&[H_2, E_{\pm\alpha}]=\pm\frac{1}{2}E_{\pm\alpha}\\
&[H_2, E_{\pm\beta}]=\mp\frac{1}{2}E_{\pm\beta}\\
&[H_2, E_{\pm(\alpha+\beta)}]=0\\
&[E_\alpha, E_{-\alpha}]=\frac{1}{2\sqrt{3}}H_1+\frac{1}{2}H_2\\
&[E_\beta, E_{-\beta}]=\frac{1}{2\sqrt{3}}H_1-\frac{1}{2}H_2\\
&[E_{\alpha+\beta}, E_{-(\alpha+\beta)}]=\frac{1}{\sqrt{3}}H_1\\
&[E_\alpha, E_\beta]=\frac{1}{\sqrt{6}}E_{\alpha+\beta}\\
&[E_\alpha, E_{\alpha+\beta}]=[E_\alpha, E_{-\beta}]=0\\
&[E_\alpha, E_{-\alpha-\beta}]=-\frac{1}{\sqrt{6}}E_{-\beta}\\
&[E_{-\alpha}, E_\beta]=[E_{-\alpha}, E_{-(\alpha+\beta)}]=0\\
&[E_{-\alpha}, E_{\alpha+\beta}]=\frac{1}{\sqrt{6}}E_\beta\\
&[E_{-\alpha}, E_{-\beta}]=-\frac{1}{\sqrt{6}}E_{-\alpha-\beta}\\
&[E_\beta, E_{\alpha+\beta}]=0
\end{aligned}
\right.
\tag{24.68}
$$

$$\begin{cases}[E_\beta,E_{-(\alpha+\beta)}]=\frac{1}{\sqrt{6}}E_{-\alpha}\\ [E_{-\beta},E_{\alpha+\beta}]=-\frac{1}{\sqrt{6}}E_\alpha\\ [E_{-\beta},E_{-(\alpha+\beta)}]=0\end{cases}$$

注意，在所取的坐标系$\{e_1,e_2\}$下，$\mathscr{R}$ 的度规张量具有标准形式

$$g_{ij}=(e_i,e_j)=\delta_{ij} \tag{24.69}$$

所有根矢量的协变分量与逆变分量是相同的。

（3） l 秩（$l\geqslant3$）的单李代数

高秩（$l\geqslant3$）的单李代数的根系图，可以通过将2维图形（$l=2$）向高维空间推广来获得。这里只能介绍一下这种推广的方法和结果。

A_2的推广。为了便于推广，在三维欧氏空间$\mathscr{R}_3$中取正交基$\{e_1,e_2,e_3\}$，使其如下归范化

$$(e_i,e_j)=\frac{1}{6}\delta_{ij}$$

则6个共面($\mathscr{R}_2$)矢量$\{(e_i-e_j)；i,j=1,2,3\}$恰好构成A_2的根系。推广到l秩的情形，应在$(l+1)$维欧氏空间$\mathscr{R}_{l+1}$中取归范基$\{e_1,e_2,\cdots,e_{l+1}\}$：

$$(e_i,e_j)=\frac{1}{2(l+1)}\delta_{ij} \tag{24.70}$$

矢量组

$$\{(e_i-e_j)；i,j=1,2,\cdots,l+1\} \tag{24.71}$$

张成一个l维平面$\mathscr{R}_l$（它过原点且垂直于矢量$\sum\limits_i e_i$）。(24.71)中含有$l(l+1)$个矢量，形成l秩单李代数的一个可能的根系，它所决定的单李代数记作A_l。显然，A_l的维数为

$$n=l+l(l+1)=(l+1)^2-1 \tag{24.72}$$

B_2的推广。在$\mathscr{R}_2$中取归范基$\{e_1, e_2\}$

$$(e_i, e_j) = \frac{1}{6}\delta_{ij}$$

则B_2的根系为（8个根）

$$\{\pm e_1, \pm e_2, (\pm e_1 \pm e_2)\}$$

（对照B_2的根图）。推广到l秩的情形，应在$\mathscr{R}_l$中取归范基$\{e_1, e_2, \cdots, e_l\}$

$$(e_i, e_j) = \frac{1}{4l-2}\delta_{ij} \tag{24.73}$$

则矢量组

$$\{\pm e_i, (\pm e_i \pm e_j): i<j, \ i, j=1, 2, \cdots, l\} \tag{24.74}$$

为l秩单李代数的另一种可能的根系，相应的单李代数记作B_l。其中含有$2l+2l(l-1)=2l^2$个根，所以B_l的维数为

$$n=l+2l^2=l(2l+1) \tag{24.75}$$

C_2的推广。C_2的根图为B_2的根图转动45°，所以$B_2 \cong C_2$。因而C_2的推广实为B_2的另一种可能的推广。仍从C_2的根图出发，在基$\{e_1, e_2\}$

$$(e_i, e_j) = \frac{1}{12}\delta_{ij}$$

之下，C_2的根系可表为（参考B_2的根图）

$$\{\pm 2e_1, \pm 2e_2, (\pm e_1 \pm e_2)\}$$

推广到l秩的情形，在$\mathscr{R}_l$中取归范基$\{e_1, e_2, \cdots, e_l\}$

$$(e_i, e_j) = \frac{1}{4l+4}\delta_{ij} \tag{24.76}$$

则矢量组

$$\{\pm 2e_i, (\pm e_i \pm e_j): i<j, i, j=1, 2, \cdots, l\} \tag{24.77}$$

为 l 秩单李代数的第三种可能的根系，相应的单李代数记作C_l。C_l的维数与B_l的相同

$$n=l(2l+1) \qquad (24.78)$$

D_2的推广。在平面$\mathscr{R}_2$上取基$\{e_1,e_2\}$

$$(e_i,e_j)=\frac{1}{4}\delta_{ij}$$

则D_2的根系能写为（见D_2的根图）

$$\{(\pm e_1\pm e_2)\}$$

推广到 l 秩的情形，在$\mathscr{R}_l$中取基$\{e_1,e_2,\cdots,e_l\}$

$$(e_i,e_j)=\frac{1}{4l-4}\delta_{ij} \qquad (24.79)$$

则矢量组

$$\{(\pm e_i\pm e_j):\ i<j,\quad i,j=1,2,\cdots,l\} \qquad (24.80)$$

为 l 秩单李代数的第四种可能的根系，相应的李代数记作D_l。根系(24.80)中有$2l(l-1)$个根，所以D_l的维数为

$$n=l+2l(l-1)=l(2l-1) \qquad (24.81)$$

在 $l=3$ 的情形有一个重复

$$A_3\cong D_3 \qquad (24.82)$$

这可从它们的根系看出。这两个根系中根矢的长度都等于1/2，都含有12个根矢，其分布都如图24.4所示。因而二者是合同的。

图24.4是在半径为 1/2 的球面上以两两相同的夹角画出四个大圆，12 个交点便是 12 个根矢的末端。

上述的推广还没有穷尽秩数大于 2 的单李代数，剩下来的有以下四种同构类型。

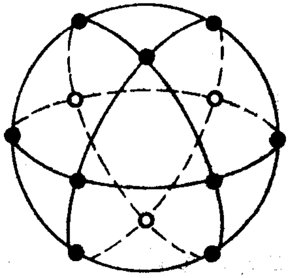


图24.4　$A_3\cong D_3$ 的根系（根的分布）

F_4 它的根系为B_4的根系再加入另外16个根矢

$$\left\{\frac{1}{2}(\pm e_1 \pm e_2 \pm e_3 \pm e_4)\right\} \tag{24.83}$$

共有32＋16＝48个根。所以F_4是 4 秩52维的。

E_6 它的根系为A_5的根系再加入另外42个根矢

$$\left\{\pm\sqrt{2}\,e_7,\ \frac{1}{2}(\pm e_1 \pm e_2 \pm e_3 \pm e_4 \pm e_5 \pm e_6) \pm \frac{1}{\sqrt{2}} e_7\right\} \tag{24.84}$$

其中小括号内三项取正号三项取负号。总共有30＋42＝72个非零根。E_6是 6 秩78维的。

E_7 它的根系为A_7的根系再加入另外70个根矢

$$\left\{\frac{1}{2}(\pm e_1 \pm e_2 \pm e_3 \pm e_4 \pm e_5 \pm e_6 \pm e_7 \pm e_8)\right\} \tag{24.85}$$

其中小括号内四项取正号四项取负号。因而 E_7 共有 56＋70＝126个非零根，它是 7 秩133维的单代数。

E_8 它的根系为D_8的根系再加入另外128个根矢

$$\left\{\frac{1}{2}(\pm e_1 \pm e_2 \pm e_3 \pm e_4 \pm e_5 \pm e_6 \pm e_7 \pm e_8)\right\} \tag{24.86}$$

其中小括号内取偶数个正号。所以E_8的 根系 包含 112＋128＝240个根，它是 8 秩248维的单代数。

至此我们已经得到了单李代数的一切同构类型，它们由四系典型李代数

$$A_l(l\geqslant 1),\ B_l(l\geqslant 1),\ C_l(l\geqslant 1),\ D_l(l\geqslant 3)$$

和五个例外李代数

$$G_2,\ F_4,\ E_6,\ E_7,\ E_8$$

所取尽。其中

$$A_1 \cong B_1 \cong C_1,\quad B_2 \cong C_2,\quad A_3 \cong D_3$$

（半单代数D_2不是单的，故未算在内）。由于所有这些单李代数的根系已经知道，原则上就可以写出它们的结构常数（或标准基的对易式）。换言之，这些单代数的结构都是已知的。因为半单代数是单代数的直和，所以半单李代数的结构和分类问题也随之解决。

24.6 单纯根和邓金(Dynkin)图

范·德·瓦尔登的根图，对秩数不大于 2 的单李代数的根系，给出了一种简洁的描述。但对于 $l \geqslant 3$ 的情况，这种描述就比较复杂了。邓金给出了一种更为优越的描述方法，使得在 $l \geqslant 3$ 情况下的根系也可用二维图形表示出来，称为邓金图。由它容易得到根矢的完全集合及有关根的长度和夹角的所有信息。

由于根系中的根都是以$\pm\alpha$的形式成对出现的，只要在每一对中任取一个被称为正根的，就足以确定整个根系。这需要一种规则，以便将两个反号根中之一定义为正根。借助于空间$\mathscr{R}$的任意一组基，可以给出这样的规则：在任意取定的基下，第一个非零分量（坐标）取正值的根称为正根，常用α^+表示根α是正的。显然，任意根系中都有一半正根。正根乘以正数仍为正矢（第一个非零分量取正值的矢量），两个正根之和也是正矢。

一个正根，如果它不能分解为两个正根之和，则称为单纯根。单纯根的集合常记为Π。Π是根系的非常重要的子集，它含有关于根系的所有基本信息。从而根系的分类问题将被简化为Π的分类问题，而后者可由二维的邓金图描述。

单纯根具有下列简单性质。

1° 任二单纯根之差不是正根，因而也不是单纯根。

因若$\alpha,\beta\in\Pi$，而$\alpha-\beta=\gamma$是正根，则α可写为二正根β和γ之和，与α的单纯性相抵。

2° 任二单纯根的标积是非正数，即

$$\alpha,\beta(\neq\alpha)\in\Pi\Rightarrow(\alpha,\beta)\leqslant 0$$

因若$(\alpha,\beta)>0$，则整数$2(\alpha,\beta)/(\alpha,\alpha)\geqslant 1$，因而$(\beta-\alpha)$与$-(\beta-\alpha)=(\alpha-\beta)$都是根（$(\beta-\alpha)$在$\beta$的$\alpha$根列之中）且有一个是正根，这与1°相抵。

3° 单纯根系是线性无关组。

假如$\{\alpha,\beta,\gamma,\cdots\}=\Pi$是相关的，则有不全为零的数$c_\alpha$，$c_\beta$，…，使

$$c_\alpha\alpha+c_\beta\beta+c_\gamma\gamma+\cdots=0$$

因正根的正系数组合仍为正矢($\neq 0$)，负系数组合也不为零，故上式中的系数必有正有负。将所有负系数项移至等号右边，则得

$$u=v$$

u,v都是单纯根的正系数组合，由2°知

$$(u,v)\leqslant 0$$

这与（见(24.51)）

$$(u,v)=(u,u)>0,\ u\neq 0$$

相抵。

4° 每个正根都可写为

$$\sum_{\alpha\in\pi}m_\alpha\alpha$$

其中m_α是非负整数。

设β为一正根，它若是单纯的，则可写为上面的形式，否则可分解为正根之和$\beta=\gamma+\gamma'$。将这种分解继续下去，到不能再分解时，β便写为一些单纯根之和，整理后就是上面的形式。

既然所有正根都可表为单纯根的组合，则任意根都能如此。由此和性质3°，又知：

5° 对于 l 秩的半单李代数，恰好有 l 个单纯根，它们构成空间$\mathscr{R}$的一组基。

由性质2°和24.3节中的定理4，又有：

6° 任二单纯根的夹角 φ 和长度比 η 只能取下列数值(φ, η)

$$(90°,\text{不定}),(120°,1),(135°,\sqrt{2}),(150°,\sqrt{3})$$

由上述这些基本性质出发，不难引出另外一些进一步的有用结果。例如：

7° 任意单李代数，其单纯根最多有两种不同的长度[15]。

邓金图直接描述的是单纯根系：单纯根的个数，它们的相对长度，以及两两之间的夹角。而单纯根系决定着（生成）完全根系，从而决定着相应的李代数。因而邓金图是标记单或半单李代数的结构的非常方便的工具。邓金图的定义是：以一个黑点表示一个较短的单纯根，以一个小圈表示一个较长的单纯根；用点或圈之间连线的条数 0，1，2 和3，分别表示两个根之间的夹角为90°，120°，135°和150°。例如，在图24.3 A_2的根图中，在所示的基下，三个正根为$\alpha,\beta,(\alpha+\beta)$，其中的单纯根是$\alpha$和$\beta$（读者应以此例对照前面的一般概念并验证性质1°—7°），因而其邓金图为○——○。类似地由G_2、B_2和D_2的根图也可画出它们的邓金图（试找出这些根图中的正根和单纯根），如图24.5所示。



图24.5 2 秩李代数的邓金图

显然，如果邓金图是不连通的，就表明单纯根系是由几个互相正交的子系组成（因而完全根系也如此），每个连通子系确定一个单代数，而原半单代数是这些单代数的直和。所以，为了

作出单代数的邓金图，应只考虑连通图形。

前面讨论过的单纯根系的一些性质，将导致对邓金图的种种限制。在这些限制下能作出的邓金图是有限的，结果只有以下连通类型，它们正好穷尽全部单李代数（见图24.6）

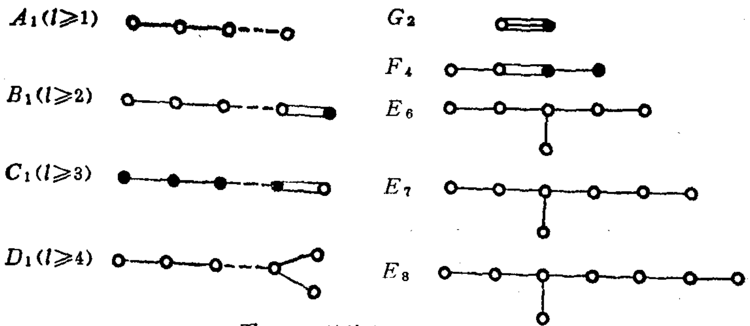


图24.6 单纯李代数的邓金图

24.7 典型群

在8.1节中，曾列举了（例3）完全线性群$GL(n)$的几个重要子群：特殊线性群（幺模线性群）$SL(n)$，幺正群$U(n)$，特殊幺正群$SU(n)$，正交群$O(n)$，特殊正交群$SO(n)$。此外$GL(n)$还有两种比较重要的子群：辛群$S_p(2n)$和洛伦兹群$O(p,q)$，$SO(p,q)$。

$$S_p(2n)=\{A: A\in GL(2n), \tilde{A}K_nA=K_n\}$$

$$K_n=\begin{pmatrix}0 & I_n\\ -I_n & 0\end{pmatrix}, \quad I_n\text{是}n\times n\text{的单位方阵}$$

$$O(p,q)=\{A: A\in GL(p+q), \tilde{A}J_{p,q}A=J_{p,q}\}$$

$$J_{p,q}=\begin{pmatrix}I_p & 0\\ 0 & -I_q\end{pmatrix}$$

$$SO(p,q)=\{A: A\in O(p,q), \det A=1\}$$

这些群作为n维（或$(p+q)$维、$2n$维）空间上的线性变换，其特征是使某一特定的双线性形$K(u,v)$保持不变。说明这一

特征与对其矩阵特征的刻画是等价的。

$$U(n), SU(n):\ K(u,v)=u_1v_1^*+u_2v_2^*+\cdots+u_nv_n^*$$

$$O(n), SO(n):\ K(u,v)=u_1v_1+u_2v_2+\cdots+u_nv_n$$

$$O(p,q), SO(p,q):\ K(u,v)=\sum_{i=1}^{p}u_iv_i-\sum_{i=p+1}^{p+q}u_iv_i$$

$$S_p(2n):\ K(u,v)=\sum_{i=1}^{n}u_iv_{n+i}-\sum_{i=n+1}^{2n}u_iv_{i-n}$$

$$=\sum_{i=1}^{n}(u_iv_{n+i}-u_{n+i}v_i)$$

此外，线性变换所作用的空间(或其矩阵)可以是复的或实的，这两种情况下相应的线性群也是不同的，通常用符号C和R来区分。例如，$SL(n,R)$表n维实幺模矩阵群，$O(n,C)$为n维复正交矩阵群，等等。有时采用$O(n)=O(n,R)$，$SO(n)=SO(n,R)$和$GL(n)=GL(n,C)$，$SL(n)=SL(n,C)$这样的简单记法。

上述这些群常被称为古典线性群或典型群。从物理的角度看，这是一批很重要的群。它们当中的$GL(n)$和$U(n)$不是半单的（因为它们显然存在阿贝尔不变子群——由单位矩阵的倍数组成），但可以分解为一个半单群($SL(n)$，$SU(n)$)和一个阿贝尔群的直积，因而也具有半单群的许多性质。$U(n)$，$SU(n)$，$O(n)$，$SO(n)$和$S_p(2n)=U(2n)\cap S_p(2n,C)$（称酉辛群）是紧致的；除了$GL(n,R)$，$O(n)$，$O(n,C)$和$O(p,q)$，$SO(p,q)$之外，都是连通的。下面来研究半单的连通群的李代数。

先考虑$SL(n)$的李代数$sl(n)$。在单位元的邻域，$SL(n)$的元可写为$g=e^v$，注意到矩阵公式

$$\det e^A=e^{\operatorname{tr}A} \tag{24.87}$$

可知：

$$\det g=1\Longleftrightarrow \operatorname{tr}v=0$$

可见$sl(n)$由所有迹为零的n阶矩阵构成，即有

$$sl(n)=\{A;\ \mathrm{tr}A=0\} \tag{24.88}$$

$sl(n)$的维数显然是n^2-1（A是$n\times n$的矩阵，只有一个迹为零的限制）。取基如下：以X_{ij}表示i行j列上的元为1而其余的元为零的矩阵，则有迹为零的如下一些矩阵

$$H_i=X_{ii}-\frac{1}{n}\sum_i X_{ii},\quad i=1,2,\cdots,n \tag{24.89}$$

$$E_{kl}=X_{kl}\qquad k\neq l,k,l=1,2,\cdots,n \tag{24.90}$$

(24.89)中的n个矩阵显然是互易的

$$[H_i,H_j]=0 \tag{24.91}$$

它们张成$sl(n)$的一个$l=(n-1)$维的可换子代数。维数可这样得出

$$\sum_{i=1}^{n}H_i=0 \tag{24.92}$$

表明n个H_i是相关的，但能组合出含$(n-1)$个矢量的无关组

$$\{(H_i-H_{i+1});\ i=1,2,\cdots,n-1\} \tag{24.93}$$

利用$\{X_{ij}\}$的对易式

$$[X_{ij},X_{i'j'}]=\delta_{ji'}X_{ij'}-\delta_{j'i}X_{i'j} \tag{24.94}$$

容易证明，每个E_{kl}是$\{\hat{H}_1,\hat{H}_2,\cdots,\hat{H}_n\}$的共同本征矢

$$\hat{H}_iE_{kl}=[H_i,E_{kl}]=\alpha_i(k,l)E_{kl} \tag{24.95}$$

本征值（根矢）为

$$\alpha(k,l)=e(k)-e(l) \tag{24.96}$$

矢量$e(k)$的i分量为

$$e_i(k)=\delta_{ik} \tag{24.97}$$

这就证明了，$\{H_1,H_2,\cdots,H_n\}$张成$sl(n)$的一个嘉当子代数，其维数为$l=n-1$；(n^2-n)个非零矢量(24.96)是相应的根系；(24.93)和(24.90)是$sl(n)$的一组标准基。

由(24.97)看出，矢量组$\{e(k);\ k=1,2,\cdots,n\}$张成一个$n=(l+1)$维空间$\mathscr{R}_{l+1}$，因而根矢(24.96)都是这个空间中的

矢量。但根矢量α满足

$$\sum_{i=1}^{n}\alpha_i=0$$

所以它们都在$\mathscr{R}_{l+1}$的由如下坐标方程

$$\sum_{i=1}^{n}x_i=0 \tag{24.98}$$

所定义的一个l维子空间（l维平面）内。这个子空间$\mathscr{R}_l$就是根矢所张成的实欧氏空间。按前面的一般结果，$\mathscr{R}_l$的度规张量需使$\mathscr{R}_l$中任意矢量的自标积满足(24.51)，即有

$$(x,x)=\sum_{kl}(\alpha(k,l),x)^2 \tag{24.99}$$

其中$x\in\mathscr{R}_l$，或$x\in\mathscr{R}_{l+1}$且满足(24.98)。我们也可以将$\mathscr{R}_{l+1}$看成一个实欧氏空间，这时$\mathscr{R}_{l+1}$的度规必须以$\mathscr{R}_l$的度规为其在子空间中的缩小，即$\mathscr{R}_l$中的矢量在$\mathscr{R}_l$中的标积与在$\mathscr{R}_{l+1}$中的相同。因此，(24.99)中的标积也可以理解为在$\mathscr{R}_{l+1}$中的标积，所以可用$\mathscr{R}_{l+1}$的度规张量g_{ij}来表示。在$\mathscr{R}_{l+1}$中采用写出$e(k)$的分量(24.97)的那个坐标系，将(24.96)和(24.97)代入(24.99)，经简单运算得到

$$(g_{ij}-2n\delta_{ij})x^ix^j=-2\left(\sum_{i=1}^{n}x^i\right)^2$$

显然

$$g_{ij}=2n\delta_{ij} \tag{24.100}$$

是上方程的解。因为这时有

$$x^i=g^{ij}x_j=\frac{1}{2n}x_i$$

$$\sum_i x^i=\frac{1}{2n}\sum_i x_i=0$$

因而方程的右端也为零。

最后，由$\mathscr{R}_{l+1}$的度规张量(24.100)，可写出$\mathscr{R}_{l+1}$中的矢

量组（基）$\{e(k)\}$的归范化条件

$$(e(k),e(l))=g^{ij}e_i(k)e_j(l)$$

$$=\frac{1}{2n}\delta_{kl}=\frac{1}{2(l+1)}\delta_{kl} \tag{24.101}$$

把(24.96)和(24.101)与（24.71)和（24.70）对照，即可看出$sl(n)$的根系与$A_l=A_{n-1}$的根系相同。于是得

$$sl(n)\cong A_{n-1} \tag{24.102}$$

现在在$sl(n)$中取一组标准基

$$\begin{cases}H_i=X_{ii}-X_{i+1i+1}, & i=1,2,\cdots,n-1\\ E_{kl}=X_{kl}, \quad k\neq l & k,l=1,2,\cdots,n\end{cases} \tag{24.103}$$

作基矢变换

$$\begin{cases}H_i'=\sqrt{-1}H_i & i=1,2,\cdots,n-1\\ U_{kl}=E_{kl}-E_{lk}, \quad k>l, & k,l=1,2,\cdots,n\\ V_{kl}=\sqrt{-1}(E_{kl}+E_{lk}), \quad k>l, & k,l=1,2,\cdots,n\end{cases} \tag{24.104}$$

新的基矢都是反厄米的矩阵

$$(H_i')^+=-H_i',U_{kl}^+=-U_{kl},V_{kl}^+=-V_{kl}$$

所以它们所有的实系数的线性组合也是反厄米矩阵。又，容易写出新基的对易式，从中可以看出，在新基下结构常数也是实的。从而可知，由新基(24.104)的一切实系数组合，可以形成一个实的李代数，其秩和维数与$sl(n)$的相同。这个实代数由所有迹为零的反厄米矩阵组成，它显然是典型群$SU(n)$的李代数$su(n)$。事实上，$SU(n)$由幺模幺正矩阵组成，而e^A为幺正的充要条件是，A为反厄米的。所以

$$su(n)=\{A; \ \mathrm{tr}A=0,A^+=-A\} \tag{24.105}$$

一般地，任一半单的（复）李代数$\mathscr{L}$，如前所证，在标准基下的结构常数是实的，从而在由变换(24.104)所确定的新基下，其结构常数也是实的。这样，新基（kl表α，lk表$-\alpha$，$k>l$

表α是正根）的所有实系数组合，带着原结构常数，便形成一个实李代数。这个李代数与$\mathscr{L}$有一组共同基(24.104)和在此基下的共同结构常数，因而与$\mathscr{L}$是同秩同维的(称为$\mathscr{L}$的实形)。可以证明，这样得到的实李代数生成的实李群是紧致的，因而称为紧（致）李代数[13][15]。所以，按上述方式由$\mathscr{L}$得到的实李代数是$\mathscr{L}$的紧实形（还存在非紧的实形，但紧实形是唯一的）。而$\mathscr{L}$称为它的实形的复扩充。

由$\mathscr{L}$与它的紧实形具有带有同样结构常数的“共同”基这一点，容易推断，这两个李代数的表示也有相应的关系：后者可由前者按类似的方式产生，因而是前者的紧实形；并且，表示的等价性与可约性，对于两者是一致的。因此，由$\mathscr{L}$的所有不可约表示，即可得到它的紧实形的全部不可约表示，反之亦然（通过复扩充）。

如上所述，我们可以说：$su(n)$是$sl(n)$的紧实形。

通过类似于对$sl(n)$和$su(n)$的讨论，同样可以证明，对典型群$SO(n,C)$、$Sp(2n,C)$、$SO(n)$、$Sp(2n)$的李代数$so(n, C)$、$sp(2n,C)$、$so(n)$、$sp(2n)$，有：$so(n)$是$so(n,C)$的紧实形，$sp(2n)$是$sp(2n,C)$的紧实形，而且

$$so(2n+1,C)\cong B_n \tag{24.106}$$

$$sp(2n,C)\cong C_n \tag{24.107}$$

$$so(2n,C)\cong D_n \tag{24.108}$$

可见，四系典型李代数（及其紧实形）都是典型群的李代数，因而得名。

由上述结果可知，典型群$SL(n+1)$，$SU(n+1)$，$SO(n+1,C)$,$SO(n+1)$，$Sp(2n,C)$，$Sp(2n)$ $(n=1,2,3,\cdots)$中除$SO(4)$和$SO(4,C)$(即D_2)之外，都是单纯的；而那两个群只是半单的，且有（注意，若$\mathscr{L}$与$\mathscr{L}'$同构，则它们的紧实形显然也同构）局部同构

$$SO(4,C)\cong SO(3,C)\times SO(3,C) \tag{24.109}$$

$$SO(4)\cong SO(3)\times SO(3) \tag{24.110}$$

此外，还有同构关系（局部）

$$SU(2)\cong SO(3)\cong Sp(2) \tag{24.111}$$

$$SL(2)\cong SO(3,C)\cong Sp(2,C) \tag{24.112}$$

$$SO(5)\cong Sp(4) \tag{24.113}$$

$$SO(5,C)\cong Sp(4,C) \tag{24.114}$$

$$SU(4)\cong SO(6) \tag{24.115}$$

$$SL(4)\cong SO(6,C) \tag{24.116}$$

应当指出，通常说的n维李群都是指n维实李群，即含n个独立实参数的群。这一点与群元是实矩阵或复矩阵无关。例如，$SU(2)$的元是复矩阵，但它是3维实李群；$SL(2)$的元也是复矩阵，但它是一个6维实李群。不过，有时也能将群在复数域中参数化，含有m个独立复参数的李群可称为m维复李群。例如，$SL(2)$的元是2×2的复矩阵，矩阵元是4个复数，但复方程$\det A=1$使得这4个复参数中只有3个独立，所以$SL(2)$也可看作是一个3维的复李群（注意$SU(2)$不可能成为复李群）。一个m维的复李群总可看作是$2m$维的实李群（一个复参数由两个实参数组成）。李群的参数就是它的李代数的坐标，因而实m维李群的李代数是实m维的（但实李代数的元可以是复矩阵），复m维李群的李代数是复m维的。同样，每个m维的复李代数，可以看作是$2m$维的实李代数（注意，后者不是前者的实形，实形是实m维的）。在李群论中，复李群和复李代数的概念可当作是一种工具。因为，复李代数的处理要比实李代数方便得多，特别是关于半单李代数的分类问题。上面所介绍的分类方法和结论都是对复代数而言的，它可以作为更加困难的实代数分类问题的引导。例如，利用复单代数分类的结果，可以直接得出紧的实单代数的完全分类，这已如前所述。

总之，由复半单李代数$\mathscr{L}$的结构和表示，便可得到由$\mathscr{L}$产生的那个（局部）李群以及由$\mathscr{L}$的紧实形产生的那个紧实（局部）李群的结构和表示。而复半单李代数的结构已如上述，是已知的。在此基础上，就可以进一步建立起关于它们的表示理论，从而得到相应的李群的表示论。

最后请读者留意，有些作者将四系典型李代数A_n、B_n、C_n、D_n分别与$su(n+1)$、$so(2n+1)$、$sp(2n)$、$so(2n)$等同起来（或与群$SU(n+1)$、$SO(2n+1)$、$Sp(2n)$、$SO(2n)$相对应），这时应将A_n、B_n、C_n、D_n理解为各自的紧实形。

§25　半单李羣李代数的表示

25.1　例：SL(2)与SU(2)的表示

我们在23.4节中已经表明，一个李群的表示可由它的李代数的表示通过指数映射来生成，二者的表示空间是一致的，因而表示的可约性与等价性等概念，也是一致的。所以，李群（局部）的表示论可简化为李代数的表示论。这样，除差一指数映射外，实际上不必区分李群（局部）与它的李代数的表示。注意到这一点，以下讨论中所提到的表示既是李群（局部）的也是它的李代数的，就不再处处指出。

在进行一般讨论之前，先研究一个简单的例子。$sl(2)\cong A_1$是一个1秩单李代数，按24.7节中的分析，$sl(2)$由所有迹为零的2×2的复矩阵组成，它是复3维的。$sl(2)$的基可取为

$$H_1=\frac{1}{2\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},\ E_\alpha=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix},\ E_{-\alpha}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}\tag{25.1}$$

其对易式为

$$\begin{cases} [H_1, E_\alpha] = \frac{1}{\sqrt{2}} E_\alpha \\ [H_1, E_{-\alpha}] = -\frac{1}{\sqrt{2}} E_{-\alpha} \\ [E_\alpha, E_{-\alpha}] = \frac{1}{\sqrt{2}} H_1 \end{cases} \tag{25.2}$$

对照24.5节中关于1秩代数的结果，可见（25.1）正是$sl(2)$ $\cong A_1$的归范化的标准基，其根为$0, \pm\alpha = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}$。如果取非归范的标准基

$$H_1' = \sqrt{2} H_1, E_\alpha' = 2E_\alpha, E_{-\alpha}' = 2E_{-\alpha} \tag{25.3}$$

则(25.2)化为

$$\begin{cases} [H_1', E_\alpha'] = E_\alpha' \\ [H_1', E_{-\alpha}'] = -E_{-\alpha}' \\ [E_\alpha', E_{-\alpha}'] = 2H_1 \end{cases} \tag{25.4}$$

为了作出$sl(2)$的不可约表示，只需作出满足（25.4）中的对易关系的不可约矩阵（算子）。以$\hat{H}'$，$\hat{E}_\alpha'$，$\hat{E}_{-\alpha}'$表示这样的矩阵（算子）组，则有

$$\begin{cases} [\hat{H}_1', \hat{E}_\alpha'] = \hat{E}_\alpha' \\ [\hat{H}_1', \hat{E}_{-\alpha}'] = -\hat{E}_{-\alpha}' \\ [\hat{E}_\alpha', \hat{E}_{-\alpha}'] = 2\hat{H}_1' \end{cases} \tag{25.6}$$

与21.2节中的$\hat{J}_3, \hat{J}_+, \hat{J}_-$的对易关系(21.9)，(21.10)，(21.11)对照，可见$\{\hat{H}_1', \hat{E}_\alpha', \hat{E}_{-\alpha}'\}$与$\{\hat{J}_3, \hat{J}_+, \hat{J}_-\}$有同样的对易式。完全重复21.2节中的推演，即得如下结果：

复3维李代数$sl(2)$的所有不可约表示由量子数

$$J = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots \tag{25.7}$$

来标记；以J为标记的不可约表示是$(2J+1)$维的，$\{\hat{H}_1', \hat{E}_\alpha',$

$\hat{E}'_{-\alpha}\}$的矩阵为

$$\hat{H}'_1=\begin{pmatrix} J & & & & & \\ & J-1 & & & 0 & \\ & & J-2 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & 0 & & & \ddots & \\ & & & & & -J \end{pmatrix}$$

$$\hat{E}'_\alpha=\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2J} & & & & \\ & 0 & \sqrt{2(2J-1)} & & 0 & \\ & & 0 & \ddots & & \\ & & & \ddots & \sqrt{2J} & \\ & 0 & & & \ddots & \\ & & & & & 0 \end{pmatrix} \qquad (25.8)$$

$$\hat{E}'_{-\alpha}=\begin{pmatrix} 0 & & & & & \\ \sqrt{2J} & 0 & & & 0 & \\ & \sqrt{2(2J-1)} & 0 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & 0 & & \ddots & \ddots & \\ & & & & \sqrt{2J} & 0 \end{pmatrix}$$

因为我们实际上关心的是实李群，通常将 $sl(2)$ 看作是6维的实李代数（每个独立复参数是两个独立实参数）。sl (2) 中的6个元$H'_1, E'_\alpha, E'_{-\alpha}, iH'_1$, iE'_α, $iE'_{-\alpha}$, 是复相关的（乘以非零系数1，1，1，i，i，i，的组合为零），但显然是实无关的：设它们的一个实（系数）组合为零，有

$$(c_1+ic_4)H'_1+(c_2+ic_5)E'_\alpha+(c_3+ic_6)E'_{-\alpha}=0$$

因 $\{H'_1, E'_\alpha, E'_{-\alpha}\}$ 复无关，上式中的三个系数必须全为零，从而6个实系数也必为零

$$c_1=c_2=\cdots=c_6=0$$

所以$\{H_1',E_\alpha',E_{-\alpha}',iH_1',iE_\alpha',iE_{-\alpha}'\}=\{I_1,I_2,I_3,I_4,I_5,I_6\}$可以作为实$sl(2)$的基，而实$sl(2)$是由$\{I_i\}$的所有实系数组合构成的。为了得到实$sl(2)$的不可约表示，可考虑实$sl(2)$的复扩充。这个复扩充是一个6维复代数，它的基$\{\bar{I}_i\}$与$\{I_i\}$满足相同的对易式，但诸$\bar{I}_i$是复无关的（$I_i$是复相关的）。做基矢变换

$$\begin{cases} A_0=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(\bar{I}_1+i\bar{I}_4),\quad A_+=\bar{I}_2+i\bar{I}_5,\quad A_-=\bar{I}_3+i\bar{I}_6 \\ B_0=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(\bar{I}_1-i\bar{I}_4), B_+=\bar{I}_2-i\bar{I}_5,\quad B_-=\bar{I}_3-i\bar{I}_6 \end{cases} \tag{25.9}$$

由（25.4）可写出$\{I_i\}$的对易式，从而得到$\{\bar{I}_i\}$的对易式，由(25.9)又得出基$\{A_0,B_0,\cdots\}$的对易关系

$$[A,B]=0 \tag{25.10}$$

$$\begin{cases} [A_0,A_+]=A_+ & [B_0,B_+]=B_+ \\ [A_0,A_-]=-A_- & [B_0,B_-]=-B_- \\ [A_+,A_-]=2A_0 & [B_+,B_-]=2B_0 \end{cases} \tag{25.11}$$

这表明，实$sl(2)$的复扩充为由$\{A_0, A_+, A_-\}$和$\{B_0, B_+, B_-\}$张成的李代数的直和，对比（25.11）和(25.4)可知，后两个代数均同构于复$sl(2)$。所以有

$$\text{实}sl(2)\text{的复扩充}\cong sl(2)\oplus sl(2) \tag{25.12}$$

由此推知实$sl(2)$的复扩充的所有不可约表示，由$sl(2)$（复）的两个不可约表示的直积给出（参看25.6节定理2）。所以每个这样的不可约表示应由两个量子数(J,J')来标记，而J和J'，由(25.7)取值

$$\begin{cases} \rho^{(J,J')}(X+Y)=\rho^{(J)}(X)\otimes I^{(J')}+I^{(J)}\otimes\rho^{(J')}(Y) \\ X=x_0A_0+x_+A_++x_-A_- \\ Y=y_0B_0+y_+B_++y_-B_- \end{cases} \tag{25.13}$$

其中$\rho^{(J)}$是复$sl(2)$的不可约表示。特别地

$$
\begin{aligned}
\rho^{(J,J')}(A_0)&=\rho^{(J)}(A_0)\otimes I^{(J')}\\
\rho^{(J,J')}(B_0)&=I^{(J)}\otimes\rho^{(J')}(B_0)\\
\rho^{(J,J')}(A_+)&=\rho^{(J)}(A_+)\otimes I^{(J')}\\
\rho^{(J,J')}(B_+)&=I^{(J)}\otimes\rho^{(J')}(B_+)\\
\rho^{(J,J')}(A_-)&=\rho^{(J)}(A_-)\otimes I^{(J')}\\
\rho^{(J,J')}(B_-)&=I^{(J)}\otimes\rho^{(J')}(B_-)
\end{aligned}
\tag{25.14}
$$

其中$I^{(J)}$是$(2J+1)$阶的单位方阵，$\rho^{(J)}(A_0)=\rho^{(J)}(B_0)$，$\rho^{(J)}(A_+)=\rho^{(J)}(B_+)$和$\rho^{(J)}(A_-)=\rho^{(J)}(B_-)$分别为(25.8)中的三个矩阵。又$\{I_i\}$和$\{\bar{I}_i\}$是两个同构的实李代数的同构基，故由后者的不可约表示即可写出前者的不可约表示。最后由(25.9)写出实$sl(2)$的表示

$$
\begin{cases}
\rho^{(J,J')}(I_1)=\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\rho^{(J,J')}(A_0)+\rho^{(J,J')}(B_0)]\\[2ex]
\rho^{(J,J')}(I_2)=\dfrac{1}{2}[\rho^{(J,J')}(A_+)+\rho^{(J,J')}(B_+)]\\[2ex]
\rho^{(J,J')}(I_3)=\dfrac{1}{2}[\rho^{(J,J')}(A_-)+\rho^{(J,J')}(B_-)]\\[2ex]
\rho^{(J,J')}(I_4)=-\dfrac{i}{\sqrt{2}}[\rho^{(J,J')}(A_0)-\rho^{(J,J')}(B_0)]\\[2ex]
\rho^{(J,J')}(I_5)=-\dfrac{i}{2}[\rho^{(J,J')}(A_+)-\rho^{(J,J')}(B_+)]\\[2ex]
\rho^{(J,J')}(I_6)=-\dfrac{i}{2}[\rho^{(J,J')}(A_-)-\rho^{(J,J')}(B_-)]
\end{cases}
\tag{25.15}
$$

$su(2)$是$sl(2)$的紧实形，因而由$sl(2)$的不可约表示(25.8)到$su(2)$的不可约表示，只需经过变换(24.104)

$$\begin{cases} M_1 = iH_1' \\ 2U_\alpha = E_\alpha' - E_{-\alpha}' \\ 2V_\alpha = i(E_\alpha' + E_{-\alpha}') \end{cases} \qquad \begin{cases} \hat{M}_1 = i\hat{H}_1' \\ 2\hat{U}_\alpha = \hat{E}_\alpha' - \hat{E}_{-\alpha}' \\ 2\hat{V}_\alpha = i(\hat{E}_\alpha' + \hat{E}_{-\alpha}') \end{cases} \tag{25.16}$$

其中$\hat{H}_1'$,$\hat{E}_\alpha'$和$\hat{E}_{-\alpha}'$由(25.8)确定。由(25.1),(25.2)和(25.3)可得

$$\begin{cases} M_1 = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{i}{2}\sigma_3, \quad U_\alpha = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{i}{2}\sigma_2 \\ V_\alpha = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{i}{2}\sigma_1 \end{cases} \tag{25.17}$$

(25.17)正是$su(2)$的常用基，它同时也是$sl(2)$的一组基。在21.2节中求$su(2)$的不可约表示时，是先将$su(2)$的基(25.17)经一复变换变为$\{H_1', E_\alpha', E_{-\alpha}'\}$，然后作出后者的表示(25.8)的。注意$\{H_1', E_\alpha', E_{-\alpha}'\}$已不属于$su(2)$，它只是$su(2)$的复扩充$sl(2)$的基；因而所得出的表示实为$sl(2)$的表示。经变换(25.16)（$sl(2)$中的基矢变换），对$sl(2)$的表示并无影响（只是在不同的基下写出）。但因新基也是带有同样结构常数的$su(2)$的基，因而就得到$su(2)$的一个表示（其他元的矩阵由这些矩阵的实组合给出）。由于两者之间只差一个变换(25.16)，是一一对应的，有时并不加以特别区分，有如§21中所作的那样。但严格地讲，两者的意义是不同的，应作如上的理解。我们感兴趣的是关于6维实代数$sl(2)$和3维实代数$su(2)$的表示；但我们看到，以3维复代数$sl(2)$的表示论为工具来解决前两个问题是方便的。正如在24.7节中指出的，这一点具有普遍意义。

25.2 完全可约性定理

半单李代数的标准基经变换(24.104)后，得到一组新基，后者（通过实组合）张成一个具有同样维数的实代数，这就是

原复代数的紧实形。由于紧的实李代数生成的是紧的实李群，而后者的表示是完全可约的（见12.2节），所以前者的表示也完全可约。由此可推知，任意复半单李代数的紧实形的表示完全可约；因而复半单李代数的表示是完全可约的。所以，半单（复）李群的表示是完全可约的。这样就将关于紧李群的表示的完全可约性定理推广到所有半单李群中去。

已在12.3节的一般讨论中指出，在不计等价表示的差别时，可约表示的约化是唯一的。因而，对半单李群来说，它的任意表示的构造，完全取决于它的不可约表示的构造，以及这可约表示由哪些不可约表示（的直和）构成。所以，半单李群（李代数）的表示论的基本问题（与有限群一样），也是关于其不可约表示的构造与性质，以及如何将可约表示（例如不可约表示的直积）约化的问题。

25.3 表示的权

设$\mathscr{L}$是一半单李代数，并在其中取定一组标准基$\{H_1, H_2, \cdots, H_l, E_\alpha, E_\beta, \cdots, E_\nu\}$。考虑$\mathscr{L}$的一个以$\mathscr{V}=\{\psi\}$为表示空间的表示，它显然由$\mathscr{L}$的基所（同态）对应的$\mathscr{V}$上的算子（矩阵）组$\{\hat{H}_1, \hat{H}_2, \cdots, \hat{H}_l, \hat{E}_\alpha, \hat{E}_\beta, \cdots, \hat{E}_\nu\}$给定，而这组算子与$\mathscr{L}$的基满足同样的对易式

$$\begin{cases}[\hat{H}_i, \hat{H}_j]=0\\ [\hat{H}_i, \hat{E}_\alpha]=\alpha_i\hat{E}_\alpha\\ [\hat{E}_\alpha, \hat{E}_{-\alpha}]=\alpha^i\hat{H}_i\\ [\hat{E}_\alpha, \hat{E}_\beta]=\begin{cases}N_{\alpha\beta}\hat{E}_{\alpha+\beta}, & (\alpha+\beta)\text{是非零根}\\ 0, & (\alpha+\beta)\text{不是根}\end{cases}\end{cases} \tag{25.18}$$

其中$N_{\alpha\beta}$由(24.65)给出。假定$\mathscr{L}$的根系是已知的，则(25.18)是由根（$\mathscr{L}$的结构）确定的对易式。由于l（$\mathscr{L}$的秩）个$\hat{H}_i$互易，它们在$\mathscr{V}$中具有共同的本征矢ψ_m，即

$$\hat{H}_i\psi_m=m_i\psi_m,\quad i=1,2,\cdots,l \tag{25.19}$$

本征值

$$m=(m_1, m_2, \cdots, m_l) \tag{25.20}$$

可看作一个 l 维矢量，m_i是它的协变（与 H_i 协变）分量。这个矢量m称为表示的一个权矢量或权。显然ψ_m也是算子$\lambda^i\hat{H}_i$的本征矢，相应的本征值为$\lambda^i m_i=(\lambda, m)$，有

$$(\lambda^i\hat{H}_i)\psi_m=\lambda^i m_i\psi_m=(\lambda, m)\psi_m \tag{25.21}$$

因为属于不同本征值的一个（或一组）算子的本征矢是线性无关的，所以$\mathscr{V}$中属于不同的权的矢量是线性无关的。由此又知，一个表示的权的个数不能超过表示的维数。属于某个权的线性独立的矢量的个数称为该权的重数。

若ψ_m属于权m，则$\hat{H}_l\psi_m$和$\hat{E}_\alpha\psi_m$满足

$$\hat{H}_i(\hat{H}_l\psi_m)=\hat{H}_l(\hat{H}_i\psi_m)=m_i(\hat{H}_l\psi_m) \tag{25.22}$$

$$\hat{H}_i(\hat{E}_\alpha\psi_m)=[\hat{H}_i, \hat{E}_\alpha]\psi_m+\hat{E}_\alpha\hat{H}_i\psi_m=(\alpha_i+m_i)\hat{E}_\alpha\psi_m \tag{25.23}$$

可见当$\hat{E}_\alpha\psi_m\neq 0$时，$(\alpha+m)$也是权，而$\hat{H}_l\psi_m$和$\hat{E}_\alpha\psi_m$分别为属于权$m$和$(\alpha+m)$的本征矢。

利用上面这一性质，可以进一步证明，表示空间的基矢可以取为算子组$\{\hat{H}_1, \hat{H}_2, \cdots, \hat{H}_l\}$的共同本征矢，从而这组算子的矩阵被同时对角化。先假定表示是不可约的，考虑由ψ_m产生的一切可能的矢量

$$\cdots\hat{E}_\gamma\hat{E}_\beta\hat{E}_\alpha\psi_m \tag{25.24}$$

所张成的$\mathscr{V}$的子空间。由于上述矢量在算子组$\{\hat{H}_1, \hat{H}_2, \cdots, \hat{E}_\alpha, \cdots\}$的作用下仍变为(25.24)形的矢量，它们张成的子空间将是表示的不变子空间。但已假定表示是不可约的，这个不变子空间必为整个表示空间$\mathscr{V}$，即$\mathscr{V}$可由(25.24)形的矢量张成。在(25.24)中任取数目等于$\mathscr{V}$的维数的无关矢量，便形成$\mathscr{V}$的一组基；而按(25.23)，每个这样的矢量都是$\{\hat{H}_1, \hat{H}_2, \cdots, \hat{H}_l\}$的本征矢。若表示是可约的，则按完全可约性定理，它可分解为

不可约表示的直和，$\hat{H}_i$的矩阵可写为对角矩阵的直和，故其本身也是对角的。

(25.23)表明，表示的权与$\mathscr{L}$的根具有相类似的性质。这是由于，$\mathscr{L}$的根实际上是一个特殊的表示——伴随表示（见24.2节)的权。当然，根的某些性质是一般权所没有的，例如非零根的重数都是1，而一般表示的权的重数可以大于1。由某一本征矢ψ_m出发，分别用$\hat{E}_\alpha$和$\hat{E}_{-\alpha}$多次作用，直到出现零矢为止，按(25.23)可得一本征矢的叙列，相应地得到一个权m的α叙列

$$m-p\alpha, m-(p-1)\alpha, \cdots, m, m+\alpha, \cdots, m+q\alpha \tag{25.25}$$

其中p、q是非负整数，$[m-(p+1)\alpha]$和$[m+(q+1)\alpha]$不是权。利用24.3节中证明(24.46)的方法，同样可得

$$\frac{2(m, \alpha)}{(\alpha, \alpha)}=p-q \tag{25.26}$$

注意叙列(25.25)中含有$m-(p-q)\alpha$，便得出类似于关于根的性质的定理3的结论：若m是某个表示的权，α是$\mathscr{L}$的任意非零根；则$2(m, \alpha)/(\alpha, \alpha)$是整数，且$m-[2(m, \alpha)/(\alpha, \alpha)]\alpha$也是这个表示的权。并且可以进一步证明（对表示空间$\mathscr{V}$关于由$\psi_m$产生的本征矢叙列所张成的子空间的商空间，重复上面的论证），权m与$m-[2(m, \alpha)/(\alpha, \alpha)]\alpha$有相同的重数。

已知$\mathscr{L}$的单纯根系是l个线性无关的l维矢量（见24.6节）：$\alpha(1), \alpha(2), \cdots, \alpha(l)$；因而权$m$（$l$维矢量）总可写成单纯根的线性组合

$$m=\sum_{i=1}^{l} c_i \alpha(i)$$

代入(25.26)，并令其中的α依次取遍l个单纯根，可得l个方程

$$\sum_{i=1}^{l}\frac{2(\alpha(i),\alpha(j))}{(\alpha(i),\alpha(i))}c_i=\text{整数},\ j=1,2,\cdots,l$$

注意这个以c_i为未知数的方程组的系数都是实的，而且其行列式不为零（系数可用$\mathscr{R}_l$的度规张量写出：$2g_{ij}/g_{ii}$)，可见c_i必为实数。由此推知：$\mathscr{L}$的所有表示的权，都是$\mathscr{L}$的根系所张成的实l维欧氏空间$\mathscr{R}_l$中的矢量。每个表示的权形成空间$\mathscr{R}_l$中的一个有限矢量系（个数不超过表示的维数）或格点，并具有一定的对称性质。

考虑空间$\mathscr{R}_l$中的变换S_α，S_α表示对于过原点且垂直于根矢α的超平面的反映操作

$$S_\alpha\xi=\xi-2\frac{(\xi,\alpha)}{(\alpha,\alpha)}\alpha,\ \xi\in\mathscr{R}_l \qquad (25.27)$$

见图25.1。如在上式中取$\xi=m$，即可看出，若m是某表示的权，则$S_\alpha m$也是这个表示的权。注意到$S_\alpha^{-1}=S_\alpha(S_\alpha^2=1)$，$S_\alpha$将不同的权变为不同的权。因而，对于一个表示的所有权来说，S_α乃是一个置换，对每一根α有一个这样的置换。所有S_α的全体，一般并不成群，但它们的一切可能的乘积生成一个群，称为$\mathscr{L}$的外尔（Weyl）群。$\mathscr{L}$的外尔群，对于$\mathscr{L}$的任意表示的权

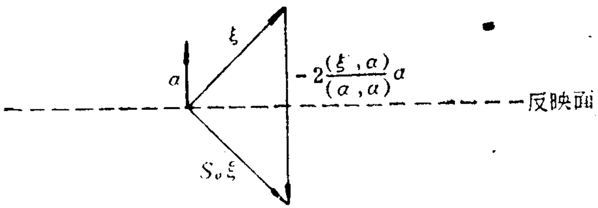


图25.1　反映操作S_α

来说，是一个置换群（S_k的子群，k是权的个数）。通过外尔群中的操作可以相互变换的权，称为是等价的。权m与

$m-\frac{2(m,\alpha)}{(\alpha,\alpha)}\alpha$ 有相同的重数这一命题，显然也可以表为：等价的权有相同的重数。

可以将上面的主要结果概括为下面的两个定理。

定理1 半单李代数（秩为 l）$\mathscr{L}$ 的任意表示的权具有性质：

1° 给定表示的权的集合是 $\mathscr{L}$ 的根系所张成的 l 维实欧氏空间 $\mathscr{R}_l$ 中的有限矢量（个数不超过表示的维数）组；

2° 这个矢量组在 $\mathscr{L}$ 的外尔群的操作下不变；

3° 等价的权有相同的重数；

4° 对任意权 m 和 $\mathscr{L}$ 的任意根 α，$\frac{2(m,\alpha)}{(\alpha,\alpha)}$ 都是整数。

定理2 半单李代数的任意表示空间 $\mathscr{V}$ 的基可由权的本征矢组成，其中属于每个权的本征矢的个数等于这个权的重数；表示的算子 $\hat{H}_1,\hat{H}_2,\cdots,\hat{H}_l,\hat{E}_\alpha,\hat{E}_\beta,\cdots,\hat{E}_\nu$ 对此基的作用（相应的矩阵）为

$$\hat{H}_i\psi_{m,k}=m_i\psi_{m,k} \tag{25.28}$$

$$\hat{E}_\alpha\psi_{m,k}=\begin{cases}\sum\limits_{k'}c_{k'}\psi_{m+\alpha,k'}, & \text{当}m+\alpha\text{是权}\\ 0, & \text{当}m+\alpha\text{不是权}\end{cases} \tag{25.29}$$

其中，基矢 $\psi_{m,k}$ 的第一个下标 m 表示它所属的权，第二个下标 k 用以区分属于同一个权的不同基矢。

显然，表示的维数等于它的所有权的重数之和。

例 典型群的表示的权

A_l 的根系的 $\mathscr{R}_l$ 空间是空间 $\mathscr{R}_{l+1}$ 中由坐标方程 $\sum\limits_{i=1}^{l+1}x_i=0$ 确定的超平面。因此，$\mathscr{R}_l$ 中的矢量，可作为 $\mathscr{R}_{l+1}$ 中满足分量和恒为零的矢量来研究。已知，在 $\mathscr{R}_{l+1}$ 的基(24.70)之下，A_l 的根

系为(24.71)，或

$$\alpha(i,j)=e_i-e_j$$

而A_l的任意表示的任一权$m\in\mathscr{R}_l$为

$$m=m_1e_1+m_2e_2+\cdots+m_{l+1}e_{l+1} \tag{25.30}$$

$$\sum_{i=1}^{l+1}m_i=0 \tag{25.31}$$

由(24.70)算出

$$(\alpha,\alpha)=\frac{2}{2(l+1)}=\frac{1}{l+1},\ (m,\alpha)=\frac{m_i}{2(l+1)}-\frac{m_j}{2(l+1)}$$

从而得

$$\frac{2(m,\alpha)}{(\alpha,\alpha)\alpha}=m_i-m_j=\text{整数} \tag{25.32}$$

将(25.32)代入(25.31)，有

$$\sum_{i=1}^{l+1}(m_j+\text{整数})=(l+1)m_j+\text{整数}=0$$

所以又有

$$m_i=\frac{\text{整数}}{l+1} \tag{25.33}$$

(25.33)和(25.32)表明，A_l的任何表示的权在$\mathscr{R}_{l+1}$的标准基下的分量只能取整数的$(l+1)$分之一值，而且任二分量之差为整数。A_l的外尔群的生成元S_α对权m的作用为

$$\begin{aligned}S_\alpha m&=m-\frac{2(m,\alpha)}{(\alpha,\alpha)}\alpha=m-(m_i-m_j)(e_i-e_j)\\&=m_1e_1+\cdots+m_je_i+\cdots+m_ie_j+\cdots+m_{l+1}e_{l+1}\end{aligned} \tag{25.34}$$

可见，这个作用是对换m的第i和第j个分量。注意到任意个对象的置换群可由其中两两对象的对换生成，就可看出，A_l的外尔群对于任意表示的权来说，乃是权的分量的置换群。因此，如果m是某表示的一个权，则将m的分量进行一切可能的置换

便得到m的所有等价（相同重数）权；而这个表示的权的集合，将由若干个这样的等价权的组构成。

对于B_l，经类似的分析，有如下结果：任意权的分量（在$\mathscr{R}_l$的标准基下）或者都是整数，或者都是半整数。B_l的外尔群，对于权是其分量的可以有任意个符号改变的置换群。因而彼此等价的权，是那些其分量只有符号上和次序上的差别的权。

对于C_l，权的分量都是整数，其外尔群对权的作用与B_l相同。

对于D_l，权的分量的可取值与B_l的情况相同；D_l的外尔群对权的作用是，权分量的可以有任意偶数个符号改变的置换群。

25.4 不可约表示的首权

从前面的讨论中可以看出，权的概念对于半单李群李代数的表示论是很重要的。例如，25.3节的定理2已经表明，$\mathscr{L}$的表示的矩阵在相当程度上是由这个表示的权（及其重数）决定的（$\mathscr{L}$的根系是已知的）。能够进一步证明，不可约表示被它的一个权——首权唯一地确定（可差一等价变换）。从而，可以用首权来标记不可约表示，并将其分类。

我们能够对空间$\mathscr{R}_l$中的矢量编序。为此，需先在$\mathscr{R}_l$中取定一组基（坐标系），然后将$\mathscr{R}_l$中的矢量在此基下的分量（坐标）加以比较。一个矢量，若其第一个非零分量是正的，则称这个矢量为正的；若其第一个非零分量是负的，则称这个矢量为负的。显然非零矢量不是正的就是负的。若一矢量与另一矢量的差为正矢量，则称这个矢量高于（或大于）另一矢量。因为权（包括根）是$\mathscr{R}_l$中的矢量，它们的正负、高低（或大小）都是已定义了的。一个表示的所有权中之最高者，称为这个表示的首权或最高权。彼此等价的权中之最高者，称为支配权。

定理1 设$\mathscr{L}$的单纯根系为Π，若M为$\mathscr{L}$的某个不可约表示的首权，则这个表示的所有权都可写为

$$M-\alpha(i_1)-\alpha(i_2)-\cdots-\alpha(i_k)$$

其中，$\alpha(i_1),\alpha(i_2),\cdots\alpha(i_k)\in\Pi$，而且$M$是单重的。

证明 设ψ_M是属于首权M的一个本征矢，作出如下形状的矢量

$$\hat{E}_{-\alpha(i_1)}\hat{E}_{-\alpha(i_2)}\cdots\hat{E}_{-\alpha(i)_k}\psi_M \tag{25.35}$$

其中$\alpha(i_1),\alpha(i_2),\cdots,\alpha(i_k)\in\Pi$，可重复出现。按(25.23)若这个矢量不为零，它就是属于权

$$M-\alpha(i_1)-\alpha(i_2)-\cdots-\alpha(i_k) \tag{25.36}$$

的本征矢。形如(25.35)的矢量的全体张成表示空间$\mathscr{V}$的一个子空间$\mathscr{V}'$，我们来证明$\mathscr{V}'$在所给的表示下不变。为此，只需证明$\mathscr{V}'$在算子$\{\hat{H}_i,\hat{E}_\alpha\}$下不变。

由(25.23)，显然$\mathscr{V}'$在$\{\hat{H}_i\}$下不变。当$\alpha\in\Pi$时，由$\mathscr{V}'$的定义，显然$\mathscr{V}'$在$\hat{E}_{-\alpha}$下也不变。在24.6节中曾指出，任二单纯根之差不可能为正根；同理，其差也不能是负根，故单纯根之差不是非零根。所以有（见(24.55)式）

$$[E_\alpha,E_{-\beta}]=\delta_{\alpha\beta}\alpha^i H_i,\quad \alpha,\beta\in\Pi$$

于是

$$\hat{E}_\alpha\hat{E}_{-\beta}=\delta_{\alpha\beta}\alpha^i\hat{H}_i+\hat{E}_{-\beta}\hat{E}_\alpha,\ \alpha,\beta\in\Pi \tag{25.37}$$

利用此式，可将作用于(25.35)上的$\hat{E}_\alpha$连续地向右搬动，最后$\hat{E}_\alpha$必碰到ψ_M，得

$$\hat{E}_\alpha\psi_M=0 \tag{25.38}$$

若$\hat{E}_\alpha\psi_M\neq0$，则$M+\alpha$是权，这与$M$是首权的前提相抵。所以，$\mathscr{V}'$在$\hat{E}_\alpha(\alpha\in\Pi)$下也不变。

下面要证明的是，当$\pm\alpha\overline{\in}\Pi$时，$\mathscr{V}'$在$\hat{E}_\alpha$下不变。在24.6节已表明，任意正根可写为

$$\sum_{i=1}^{l} k_i \alpha(i) = \sum_{\alpha \in \Pi} k_\alpha \alpha$$

$k_i(k_\alpha)$是非负整数，$\{\alpha(1), \alpha(2), \cdots, \alpha(l)\} = \Pi$。同理，任意负根可写为与上式差一负号的形状。所以，任意根α都可写为

$$\alpha = \pm \sum_{\alpha \in \Pi} k_\alpha \alpha = \pm \sum_{i=1}^{l} k_i \alpha(i) \tag{25.39}$$

当$\sum_{i=1}^{l} k_i = 1$时，$\alpha = \pm \alpha(j)$，$\mathscr{V}'$在$\hat{E}_\alpha$下的不变性已得证。按归纳法，设$\sum_{i=1}^{l} k_i = n$时$\alpha = \pm \gamma$，命题成立；则$\sum_{i=1}^{l} k_i = n+1$时，$\alpha = \pm(\gamma + \alpha(j))$假定$\alpha$为正根（负根也一样），有$\alpha = \gamma + \alpha(j)$，要证$\mathscr{V}'$在$\hat{E}_\alpha = \hat{E}_{\gamma+\alpha(j)}$下不变。由

$$E_\alpha = \frac{1}{N_{\gamma, \alpha(j)}} [E_\gamma, E_{\alpha(j)}]$$

得

$$\hat{E}_\alpha = N_{\gamma, \alpha(j)}^{-1} (\hat{E}_\gamma \hat{E}_{\alpha(j)} - \hat{E}_{\alpha(j)} \hat{E}_\gamma) \tag{25.40}$$

因已知$\mathscr{V}'$在$\hat{E}_\gamma$和$\hat{E}_{\alpha(j)}$下不变，由上式便知$\mathscr{V}'$在$\hat{E}_\alpha$下不变。这就证明了，对任意根α，$\mathscr{V}'$在$\hat{E}_\alpha$下不变。但$\mathscr{V}$是不可约的，故必有

$$\mathscr{V}' = \mathscr{V}$$

亦即形如(25.35)的矢量的集合张成整个表示空间$\mathscr{V}$. 如果此表示还有不同于(25.36)的权，则属于这个权的本征矢将独立于(25.35)的所有矢量(不同权的本征矢线性无关)；这是不可能的。这就证明了，表示的所有权都可写为(25.36)的形状。

由(25.36)可见，只有当其中的诸α（注意，它们彼此不能抵消）都不出现时，才得到首权M。由(25.35)知，属于M的本征矢只有一个独立的ψ_M。所以M是单重的。

定理 2 若两个不可约表示的首权相等，则这两个表示等

价。

证明 设$\{\hat{H}_i, \hat{E}_\alpha\}$为$\mathscr{L}$的一个不可约表示，表示空间为$\mathscr{V}$；$\{\hat{H}'_i, \hat{E}'_\alpha\}$为$\mathscr{L}$的另一不可约表示，表示空间为$\mathscr{V}'$；两个表示的首权都是$M$。令$\psi_M$为第一个表示中属于首权的本征矢，$\psi'_M$为第二个表示中属于首权的本征矢；则由定理1的证明过程知，不可约空间$\mathscr{V}$和$\mathscr{V}'$分别由下列矢量组张成

$$\{\hat{E}_{-\alpha(i_1)}\hat{E}_{-\alpha(i_2)}\cdots\hat{E}_{-\alpha(i_k)}\psi_M;\ \alpha\in\Pi\}=\{\psi_m\}$$

$$\{\hat{E}'_{-(\alpha i_1)}\hat{E}'_{-\alpha(i_2)}\cdots\hat{E}'_{-\alpha(i_k)}\psi'_M;\ \alpha\in\Pi\}=\{\psi'_m\}$$

这两组矢量，一般并不是线性无关组，所以它们并不是各自张成的表示空间的基。注意ψ_m和ψ'_m分别是算子$\{\hat{H}_i\}$和$\{\hat{H}'_i\}$的本征矢，而所属的权是相同的，都是(25.36)。我们还可看出(参看(25.35)——(25.40))，$\hat{E}_\alpha\psi_m$在$\{\psi_m\}$中的展开系数与$\hat{E}'_\alpha\psi'_m$在$\{\psi'_m\}$中的展开系数相同。如以$\hat{o}$表$\{\hat{H}_i, \hat{E}_\alpha\}$中的算子，以$\hat{o}'$表$\{\hat{H}'_i, \hat{E}'_\alpha\}$中的应相算子，上述性质则可一般地表为

$$\hat{o}\psi_m=\sum_l v_{ml}\psi_l \Longleftrightarrow \hat{o}'\psi'_m=\sum_l v_{ml}\psi'_l \tag{25.41}$$

作由$\mathscr{V}$到$\mathscr{V}'$的线性映射$\hat{f}$

$$\psi_m \longrightarrow \psi'_m=\hat{f}\psi_m \tag{25.42}$$

由于$\{\psi_m\}$不是基，一般是线性相关的；因而$\mathscr{V}$中的零矢量对$\{\psi_m\}$的展开系数可以不为零，而且不唯一

$$0=\sum_m c_m\psi_m \tag{25.43}$$

于是$\mathscr{V}$中零矢的$\hat{f}$象

$$\hat{f}0=\sum_m c_m\psi'_m \tag{25.44}$$

的唯一性（等于零）有待证明。

设由所有的(25.44)张成的$\mathscr{V}'$的子空间为$\mathscr{V}'_0$，由(25.41)易证，$\mathscr{V}'_0$在$\hat{o}'$下不变（以$\hat{o}$作用(25.43)$\Rightarrow\sum_{m,l}c_m v_{ml}\psi_l=0\Rightarrow$ $\sum_{m,l}c_m v_{ml}\psi'_l\in\mathscr{V}'_0$，又由(25.41)$\Rightarrow\hat{o}'(\sum_m c_m\psi'_m)=\sum_{m,l}c_m v_{ml}\psi'_l$，所

$\vartheta'(\sum_m c_m\psi'_m)\in\mathscr{V}'_0$）。但$\mathscr{V}'$的不可约性要求它没有在$\vartheta'$下不变的真子空间，从而必须有

$$\mathscr{V}'_0=\{0\}\text{或}\mathscr{V}'_0=\mathscr{V}'$$

若第二种情形成立，则有$\psi'_M\in\mathscr{V}'_0$。因不同权的本征矢量是线性无关的，(25.43)中有非零系数的ψ_m必须属于同一权，$\psi'_M\in\mathscr{V}'_0$要求(25.43)中的ψ_m都属于首权M。但首权是单重的，故有

$$\psi_m=b_m\psi_M$$

代回(25.43)得

$$(\sum_m c_m b_m)\psi_M=0\Rightarrow\sum_m c_m b_m=0$$

它的$\hat{f}$象是（由定义(25.42)）

$$(\sum_m c_m b_m)\psi'_M$$

必为零。这与$\psi'_M\in\mathscr{V}'_0$相抵。所以只有第一种情形能成立：$\mathscr{V}'_0=\{0\}$。这就证明了(25.44)对于所有满足(25.43)的系数$\{c_m\}$都等于零，即证明了$\hat{f}$的单值性。同样可证$\hat{f}$的逆也是单值的。因此，$\hat{f}$是一一的线性映射。

由(25.41)和(25.42)易证，对任一$\psi=\sum_m a_m\psi_m\in\mathscr{V}$，有

$$\vartheta'\hat{f}\psi=\hat{f}\vartheta\psi,\ \psi\in\mathscr{V}$$

从而得到

$$\vartheta'\hat{f}=\hat{f}\vartheta\text{或}\vartheta'=\hat{f}\vartheta\hat{f}^{-1}\tag{25.45}$$

上式表明由ϑ和ϑ'确定的$\mathscr{L}$的两个表示是等价的（对照(11.6)式）。

定理2表明，半单李代数的不可约表示由它的首权唯一（不计等价）确定。因此，要决定半单李代数的不可约表示，就需研究空间$\mathscr{R}_l$中哪些矢量可以作为不可约表示的首权。

设M是一个不可约表示的首权，$\alpha\in\Pi$是$\mathscr{L}$的任一单纯根，则按25.3节定理1之2°，知

$$M-\frac{2(M,\alpha)}{(\alpha,\ \alpha)}\alpha$$

也是这个表示的一个权。注意α是正的，而M是表示的首权，必有

$$\frac{2(M,\alpha)}{(\alpha,\ \alpha)}\geqslant 0$$

反之，能够证明[15]，若$\mathscr{R}_l$中某矢量M能使上式对$\mathscr{L}$的所有单纯根α都成为非负整数，则这M必为$\mathscr{L}$的一个不可约表示的首权。于是有下述定理。

定理3　$M\in\mathscr{R}_l$是$\mathscr{L}$的某个不可约表示之首权的充要条件是：

$$\frac{2(M,\boldsymbol{\alpha}(i))}{(\boldsymbol{\alpha}(i),\boldsymbol{\alpha}(i))}=k_i,\quad i=1,2,\cdots,l$$

都是非负整数。$\Pi=\{\boldsymbol{\alpha}(1),\boldsymbol{\alpha}(2),\cdots,\boldsymbol{\alpha}(l)\}$是$\mathscr{L}$的单纯根系。

定理3也能以另一种形式给出。对给定的半单李代数$\mathscr{L}$，其单纯根系$\Pi=\{\boldsymbol{\alpha}(i)：i=1,2,\cdots,l\}$是已知的，因而满方阵$T=(T_{ij})$

$$T_{ij}=\frac{2(\boldsymbol{\alpha}(i),\boldsymbol{\alpha}(j))}{(\boldsymbol{\alpha}(i),\boldsymbol{\alpha}(i))}=\frac{2g_{ii}}{g_{ij}} \tag{25.46}$$

也是已知的（g_{ij}是$\mathscr{R}_l$的度规张量在基Π下的分量）。T称为$\mathscr{L}$（关于单纯根系Π）的嘉当矩阵。若$M\in\mathscr{R}_l$在基Π下的展式为

$$M=\sum_i M_i\boldsymbol{\alpha}(i) \tag{25.47}$$

则按定理3，M是$\mathscr{L}$的不可约表示的首权的充要条件是

$$\sum_j T_{ij}M_j=k_i,\quad i=1,2,\cdots,l \tag{25.48}$$

如记

$$M=\begin{pmatrix}M_1\\M_2\\\vdots\\M_l\end{pmatrix},\qquad K=\begin{pmatrix}k_1\\k_2\\\vdots\\k_l\end{pmatrix}\tag{25.49}$$

(25.49)也可缩写为矩阵方程

$$TM=K\tag{25.50}$$

或解出

$$M=T^{-1}K\tag{25.51}$$

这个表述形式直接给出了计算不可约表示首权的一种方法，全部计算归结为求嘉当矩阵的逆。

由于单李代数的根系通常是在 $\mathscr{R}_l$ 或 $\mathscr{R}_{l+1}$ 的一组正交基 $\{e_i\}$（其中基矢长度已知，这相当于 $\mathscr{R}_l$ 或 $\mathscr{R}_{l+1}$ 在此基下的度规张量已知）之下给出的，因而在基 $\{e_i\}$ 下进行计算实际上更为方便。令

$$M=\sum_i M_i e_i\tag{25.52}$$

则与(25.48)相应的方程为

$$\sum_j\frac{2(\alpha(i),\ e_j)}{(\alpha(i),\alpha(i))}M_j=k_i,\quad i=1,2,\cdots,l\tag{25.53}$$

满足(25.52)和(25.53)的矢量M，即为不可约表示的首权。

从(25.51)容易看出，若令

$$K_1=\begin{pmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix},\quad K_2=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix},\ \cdots,\ K_l=\begin{pmatrix}0\\\vdots\\0\\1\end{pmatrix}\tag{25.54}$$

则有

$$M=k_1M(1)+k_2M(2)+\cdots+k_lM(l)\tag{25.55}$$

其中

$$M(1)=T^{-1}K_1,\ M(2)=T^{-1}K_2,\cdots,M(l)=T^{-1}K_l\tag{25.56}$$

这表明，在无穷多个首权当中，可取 l 个基本权，使每个首权均可表为这 l 个基本权的非负整系数的线性组合；由(25.54)和(25.56)可知，基本权$\{M(i),\ i=1,2,\cdots,l\}$形成一线性无关组，因而是$\mathscr{R}_l$的一组基。

例　典型群的不可约表示的首权

A_l　$\{e_i\}$表示$\mathscr{R}_{l+1}$的正交基(24.70)，A_l的根系为$\{(e_i-e_j):\ i\neq j\}$，正根的集合（相对于基$\{e_i\}$的）为$\{(e_i-e_j):i<j\}$。取 l 个独立正根

$$\alpha(i)=e_i-e_{i+1},\quad i=1,2,\cdots,l \tag{25.57}$$

显然，其中的任何一个都不能写为两个正根之差。所以，(25.57)构成A_l的单纯根系。利用(24.70)，将(25.57)代入(25.53)可得

$$M_i-M_{i+1}=k_i,\quad i=1,2,\cdots,l \tag{25.58}$$

又有

$$\sum_{i=1}^{l+1}M_i=0 \tag{25.59}$$

由以上二式可解出 l 个基本权（k_i取(25.54)）

$$\begin{cases}
M(1)=\left(\dfrac{l}{l+1},\ \dfrac{-1}{l+1},\ \dfrac{-1}{l+1},\ \cdots,\ \dfrac{-1}{l+1}\right)\\
M(2)=\left(\dfrac{l-1}{l+1},\ \dfrac{l-1}{l+1},\ \dfrac{-2}{l+1},\ \cdots,\ \dfrac{-2}{l+1}\right)\\
\cdots\ \cdots\ \cdots\\
M(l)=\left(\dfrac{1}{l+1},\ \dfrac{1}{l+1},\ \cdots,\ \dfrac{1}{l+1},\ \dfrac{-l}{l+1}\right)
\end{cases} \tag{25.60}$$

任意首权可写为

$$M=\sum_{i=1}^{l}k_iM(i)$$

B_l $\{e_i\}$表示$\mathscr{R}_l$的正交基(24.73)，B_l的单纯根系为

$$\alpha(i)=e_i-e_{i+1},\ i=1,2,\cdots,l-1,\alpha(l)=e_l \tag{25.61}$$

所以方程(25.53)化为

$$\begin{cases}M_i-M_{i+1}=k_i, & i=1,2,\cdots,l-1\\ 2M_l=k_l\end{cases} \tag{25.62}$$

从而解出基本权

$$\begin{cases}M(1)=(1,0,\cdots,0)\\ M(2)=(1,1,0,\cdots,0)\\ \cdots\quad\cdots\quad\cdots\\ M(l-1)=(1,1,\cdots,1,0)\\ M(l)=\left(\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\cdots,\frac{1}{2}\right)\end{cases} \tag{25.63}$$

C_l $\{e_i\}$表示$\mathscr{R}_l$的正交基(24.76)，C_l的单纯根系为

$$\alpha(i)=e_i-e_{i+1},\ i=1,2,\cdots,l-1,\alpha(l)=2e_l \tag{25.64}$$

方程(25.53)化为

$$\begin{cases}M_i-M_{i+1}=k_i, & i=1,2,\cdots,l-1\\ M_l=k_l\end{cases} \tag{25.65}$$

解得基本权

$$\begin{cases}M(1)=(1,0,\cdots,0)\\ M(2)=(1,1,0,\cdots,0)\\ \cdots\quad\cdots\quad\cdots\\ M(l)=(1,1,\cdots,1)\end{cases} \tag{25.66}$$

D_l $\{e_i\}$表示$\mathscr{R}_l$的正交基(24.79)，D_l的单纯根系为

$$\alpha(i)=e_i-e_{i+1},i=1,2,\cdots,l-1,\ \alpha(l)=e_{l-1}+e_l \tag{25.67}$$

方程(25.53)为

$$M_i - M_{i+1} = k_i,\ i=1,2,\cdots,l-1,\ M_{l-1}+M_l=k_l \tag{25.68}$$

解得基本权

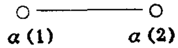
$$\begin{cases} M(1)=(1,0,\cdots,0) \\ M(2)=(1,1,0,\cdots,0) \\ \quad\cdots\quad\cdots\quad\cdots \\ M(l-2)=(1,1,\cdots,1,0,0) \\ M(l-1)=\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\cdots,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) \\ M(l)=\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\cdots,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) \end{cases} \tag{25.69}$$

25.5 不可约表示的角图

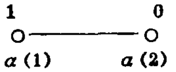
25.4节中定理 2 和定理 3 一起解决了半单李代数的不可约表示的标记和分类问题。(25.50)或(25.53)表明，不可约表示的首权M与非负的整数组$\{k_1,k_2,\cdots,k_l\}$是一一对应的。因此，每个不可约表示可用一组数$\{k_i\}$来标记，不同的$\{k_i\}$值表示不同（不等价）的不可约表示。也就是说，给定的半单李代数的不可约表示可用数组$\{k_i\}$来分类（等价类）。已在24.6节中指出，每个单李代数可用一个邓金图来表示，邓金图刻画了这个李代数的单纯根系（单纯根的个数、长度比及两两的夹角）。如果在$\mathscr{L}$的邓金图中表示单纯根$\alpha(i)$的圈或点上标以k_i，则所得的图便可表示$\mathscr{L}$的以$\{k_i\}$为标记的那个不可约表示。这种图也叫表示的角图。在一个角图中，既表明了所示的单李代数（邓金图），也表明了这个单李代数的一个不可约表示（通过$\{k_i\}$）。

例 $A_2(SL(3), SU(3))$的不可约表示的角图

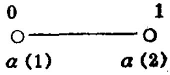
A_2的邓金图是



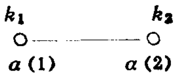
两个基本权的表示的角图是



和



A_2的任意不可约表示的角图为



由(25.60)可写出两个基本权

$$\begin{cases} M(1)=\frac{2}{3}e_1-\frac{1}{3}e_2-\frac{1}{3}e_3 \\ M(2)=\frac{1}{3}e_1+\frac{1}{3}e_2-\frac{2}{3}e_3 \end{cases} \tag{25.70}$$

注意到

$$\alpha(1)=e_1-e_2, \qquad \alpha(2)=e_2-e_3$$

基本权也可写为

$$\begin{cases} M(1)=\frac{2}{3}\alpha(1)+\frac{1}{3}\alpha(2) \\ M(2)=\frac{1}{3}\alpha(1)+\frac{2}{3}\alpha(2) \end{cases} \tag{25.71}$$

A_2的单纯根和基本权都是平面$\mathscr{R}_2$中的矢量，它们形成$\mathscr{R}_2$的两组基，如图25.2所示。

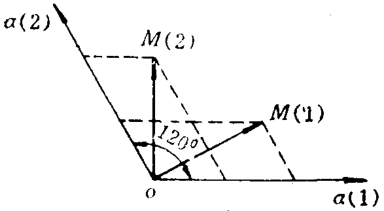


图25.2 A₂的单纯根与基本权

A_2的不可约表示之首权的通式是

$$M=k_1M(1)+k_2M(2) \tag{25.72}$$

例如，不可约表示($k_1=5, k_2=3$)

$$\overset{5}{\underset{\alpha(1)}{\bigcirc}} \text{———} \overset{3}{\underset{\alpha(2)}{\bigcirc}}$$

的首权为

$$M=5M(1)+3M(2)=[13\,\alpha(1)+11\,\alpha(2)]/3$$
$$=(13e_1-2e_2-11e_3)/3$$

25.6 表示的直积

由群的已知表示可以得到（构成）一些新的表示，例如已知表示的对偶表示、复共轭表示，以及若干已知表示的直积表示。在23.4节中我们已经表明，李群的（局部）表示与它的李代数的表示，是通过指数映射相互联系和相互生成的。因而，通过指数映射，可以由群表示的各种运算引出（定义）李代数的表示的相应运算。设李群G的李代数为$\mathscr{L}$，则G的单位元邻域内的元g和$\mathscr{L}$的零元邻域内的元v通过

$$g=e^v \tag{23.24}$$

一一对应。并且

$$\hat{A}(g)=\hat{A}(e^v)=e^{\hat{\rho}(v)} \tag{25.73}$$

是G的一个表示的充要条件为，$\hat{\rho}(v)$是$\mathscr{L}$的一个表示。由于$\hat{A}$和$\hat{\rho}$的表示（作用）空间是同一的，所以表示的等价性、可约性、表示空间的约化等概念，对二者是一致的。因此，关于G的（局部）表示论可简化为关于$\mathscr{L}$的表示论。这些论点已经在23.4节中阐明了。

由(25.73)和矩阵公式

$$\widetilde{(e^{\rho})}^{-1}=e^{-\tilde{\rho}} \tag{25.74}$$

可知，$\mathscr{L}$的表示$\rho(v)$的对偶表示应定义为

$$\sigma(v)=-\widetilde{\rho(v)} \tag{25.75}$$

由(25.73)和矩阵公式

$$(e^{\rho})^{*}=e^{\rho^{*}} \tag{25.76}$$

又知，$\mathscr{L}$的表示$\rho(v)$的复共轭表示应定义为

$$\sigma(v)=\rho^{*}(v) \tag{25.77}$$

对于指数矩阵的直积，可导出下列公式

$$\begin{aligned}
e^{A}\otimes e^{B}&=\left(\sum_{0}^{\infty}\frac{A^{n}}{n!}\right)\otimes\left(\sum_{0}^{\infty}\frac{B^{m}}{m!}\right)=\sum_{n,m}\frac{A^{n}\otimes B^{m}}{n!\,m!}\\
&=\sum_{n,m}\frac{1}{n!\,m!}(A\otimes I_{B})^{n}(I_{A}\otimes B)^{m}\\
&=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\sum_{n=0}^{k}\frac{k!}{n!\,(k-n)!}(A\otimes I_{B})^{n}(I_{A}\otimes B)^{k-n}\\
&=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}[(A\otimes I_{B})+(I_{A}\otimes B)]^{k}
\end{aligned}$$

即有

$$e^{A}\otimes e^{B}=e^{A\otimes I_B+I_A\otimes B} \tag{25.78}$$

其中I_A和I_B分别为与A和B同阶的方阵。这里用到了公式(13.3)和(13.6)，并注意到($A\otimes I_B$)与($I_A\otimes B$)是互易方阵。由(25.73)和(25.78)知，$\mathscr{L}$的两个表示$\rho(v)$和$\sigma(v)$的直积应定义为

$$\tau(v)=\rho(v)\otimes I_\sigma+I_\rho\otimes\sigma(v) \tag{25.79}$$

有时也将直积表示记作$\rho\otimes\sigma$。

设ρ_1和ρ_2是$\mathscr{L}$的两个不可约表示，分别作用于表示空间$\mathscr{V}_1$和$\mathscr{V}_2$，则直积表示作用于乘积空间$\mathscr{V}_1\otimes\mathscr{V}_2$。如$\{\psi_i^{(1)}\}$和$\{\psi_i^{(2)}\}$分别是$\mathscr{V}_1$和$\mathscr{V}_2$的基，则$\{\psi_i^{(1)}\psi_j^{(2)}\}$构成$\mathscr{V}_1\otimes\mathscr{V}_2$的一组基，且有

$$\rho_1\otimes\rho_2\psi_i^{(1)}\psi_j^{(2)}=\rho_1\psi_i^{(1)}\psi_j^{(2)}+\psi_i^{(1)}\rho_2\psi_j^{(2)} \tag{25.80}$$

基矢$\psi_i^{(1)}$和$\psi_i^{(2)}$可分别取为$\{\rho_1(H_k)\}$和$\{\rho_2(H_k)\}$的本征矢，所属的权分别为$m^{(1)}(i)$和$m^{(2)}(i)$，并设$m^{(1)}(1)$和$m^{(2)}(1)$分别为ρ_1和ρ_2的首权。由(25.80)，有

$$\rho_1\otimes\rho_2(H_k)\psi_i^{(1)}\psi_j^{(2)}=(m_k^{(1)}(i)+m_k^{(2)}(j))\psi_i^{(1)}\psi_j^{(2)} \tag{25.81}$$

可见，乘积表示的权为

$$\{(m^{(1)}(i)+m^{(2)}((j))\}$$

而基矢$\psi_i^{(1)}\psi_j^{(2)}$也是相应的本征矢。显然$\rho_1\otimes\rho_2$的首权为$(m^{(1)}(1)+m^{(2)}(1))$。由于不可约表示ρ_1和ρ_2的首权$m^{(1)}(1)$和$m^{(2)}(1)$都是单重的，即有唯一的本征矢$\psi_1^{(1)}$和$\psi_1^{(2)}$，因而$\rho_1\otimes\rho_2$的首权$(m^{(1)}(1)+m^{(2)}(1))$只有一个本征矢$\psi_1^{(1)}\psi_1^{(2)}$，所以也是单重的。

直积表示$\rho_1\otimes\rho_2$一般是可约的。按完全可约性定理，空间$\mathscr{V}_1\otimes\mathscr{V}_2$可以分解为若干个在$\rho_1\otimes\rho_2$下不变的子空间的直和。由 25.3 节的定理 2 知，每个不变子空间的基可取为$\{\rho_1\otimes\rho_2(H_k)\}$的本征矢。这些子空间的基矢的集合构成$\mathscr{V}_1\otimes\mathscr{V}_2$的一组新基，在这组新基下，$\rho_1\otimes\rho_2$已被完全约化。由于新的基矢

和老的基矢$\{\psi_i^{(1)}\psi_j^{(2)}\}$都是$\{\rho_1\otimes\rho_2(H_k)\}$的本征矢，而属于不同权的本征矢是线性独立的，所以由老的基到新的基的变换只能是对属于同一权的基矢进行重新组合。因$\rho_1\otimes\rho_2$的首权是非简并的（单重），所以老的基矢$\psi_1^{(1)}\psi_1^{(2)}$在这重新组合中只能乘以常数，因而新的基中含有基矢$c\psi_1^{(1)}\psi_1^{(2)}$。由此可知，在表示$\rho_1\otimes\rho_2$的约化中，有唯一的一个不可约表示，其表示空间中含有矢量$\psi_1^{(1)}\psi_1^{(2)}$。从而可得以下定理。

定理 1 设ρ_1和ρ_2是半单李代数$\mathscr{L}$的两个不可约表示，其首权分别为$M^{(1)}$和$M^{(2)}$，则表示$\rho=\rho_1\otimes\rho_2$中含有唯一的一个不可约成分（通常记作$\overline{\rho_1\otimes\rho_2}$），它以$M^{(1)}+M^{(2)}$为首权。

在14.3节中，我们引入了两个互易群的表示的直积概念，并用它构造了直积群的表示。对李群的李代数，也有对应的情形存在。设$G=G_1\times G_2$，三个李群的李代数分别为$\mathscr{L}$，$\mathscr{L}_1$，$\mathscr{L}_2$，则有$\mathscr{L}=\mathscr{L}_1\oplus\mathscr{L}_2$。由(25.72)和(25.78)可知，若$\rho_1$和$\rho_2$分别为$\mathscr{L}_1$和$\mathscr{L}_2$的表示，则

$$\rho(v_1+v_2)=\rho_1(v_1)\otimes I_2+I_1\otimes\rho_2(v_2),v_1\in\mathscr{L}_1,v_2\in\mathscr{L}_2 \tag{25.82}$$

为$\mathscr{L}$的一个表示，$\mathscr{L}$的表示(25.82)由$\mathscr{L}$的两个理想$\mathscr{L}_1$和$\mathscr{L}_2$的表示的直积生成；如果已知$\mathscr{L}_1$和$\mathscr{L}_2$的全部不可约表示，则能由这种直积生成$\mathscr{L}$的所有不可约表示。即有如下定理。

定理 2 若$\mathscr{L}=\mathscr{L}_1\oplus\mathscr{L}_2$，则$\mathscr{L}$的不可约表示的完全集，可由$\mathscr{L}_1$和$\mathscr{L}_2$的所有不可约表示的一切可能的直积(25.82)生成。

按定理2，只须知道单代数的不可约表示，半单代数的不可约表示便可由直积产生。这一点前面已经指出过。因为有关于李群的相应定理，这个关于李代数的定理实际上是显然的结论。这里只是把李代数的表示的直积的概念（定义）进一步明确起来。

§26 半单李代数的不可约表示的构造

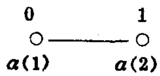
26.1 基本表示

在上节中，解决了半单李代数的不可约表示的标记和分类问题。这是通过表示的首权来实现的，而首权又可以用一组（l 个）非负整数来标记。其图形表示，是在半单李代数的邓金（根系）图上注明对应于每个单纯根的非负整数。现在要进一步研究如何作出这些不可约表示的问题。我们将证明，任一不可约表示可以通过比较简单的基本表示的直积的约化来得到；而每个基本表示又能通过更为简单的初等表示的直接乘幂的约化来得到。这样至少在原则上将上面的问题简化为作出初等表示的问题，而所有单李代数的初等表示都很容易得到。

所谓基本表示，是指那些以基本权为首权的不可约表示。因而，每个 l 秩的半单李代数有 l 个不同（不等价）的基本表示。例如，A_2 有两个基本表示



和



它们的首权是基本权(25.71)。

这类表示之所以被称为基本的，是因为有下述定理。

定理 设半单李代数 $\mathscr{L}$ 的基本表示为 ρ_1，ρ_2，…，ρ_l，而以 $(k_1, k_2, \cdots, k_l)$ 为标记的不可约表示为 $\rho_{k_1, k_2, \cdots, k_l}$，则有

$$\rho_{k_1,k_2,\cdots,k_l}=\overline{\underbrace{\rho_1\otimes\cdots\otimes\rho_1}_{k_1}\otimes\underbrace{\rho_2\otimes\cdots\otimes\rho_2}_{k_2}\otimes\cdots\otimes\underbrace{\rho_l\otimes\cdots\otimes\rho_l}_{k_l}}$$

证明 只需证明两个不可约表示的首权相等。按定义，前者的首权为

$$M=k_1M(1)+k_2M(2)+\cdots+k_lM(l)$$

又由25.6节的定理1可知，后者的首权也是上式，所以二者是

等价的。

这个定理表明，半单李代数的任意不可约表示，都可由基本表示按一种确定的方式产生。

26.2 张量表示

张量表示对构造李代数的不可约表示起着重要作用。在讨论由单代数的初等表示构造它的基本表示的方法之前，先来一般地阐明张量表示的概念。

设 ρ 是李代数 $\mathscr{L}$ 的一个 n 维表示，表示空间为 $\mathscr{V}$，$\{\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n\}$ 是 $\mathscr{V}$ 的一组基：则由基

$$\{\psi_{i_1}\psi_{i_2}\cdots\psi_{i_r}\} \tag{26.1}$$

张成的空间（n^r维）

$$\mathscr{V}^r = \underbrace{\mathscr{V}\otimes\mathscr{V}\otimes\cdots\otimes\mathscr{V}}_{r} \tag{26.2}$$

是 $\mathscr{L}$ 的表示

$$\rho^r = \underbrace{\rho\otimes\rho\otimes\cdots\otimes\rho}_{r} \tag{26.3}$$

的表示空间。通常称 $\mathscr{V}^r$ 为 r 阶张量空间，ρ^r 可称为 $\mathscr{L}$ 的由表示 ρ 产生的 r 阶张量表示或 r 次直幂表示。

若 $\mathscr{L}$ 是半单的，ρ 是 $\mathscr{L}$ 的一个不可约表示，而 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n$ 是 ρ 的分别属于权 $m(1)$，$m(2)$，$\cdots$，$m(n)$ 的本征矢，那么

$$\psi_{i_1}\psi_{i_2}\cdots\psi_{i_r}$$

就是表示 ρ^r 的属于权

$$m(i_1)+m(i_2)+\cdots+m(i_r)$$

的本征矢。若 $m(1)$ 是 ρ 的首权，则 $rm(1)$ 便是 ρ^r 的首权，相应的唯一独立的本征矢为

$$\underbrace{\psi_1\psi_1\cdots\psi_1}_{r}$$

ρ^r 中有一个唯一的不可约成分，它以 $rm(1)$ 为首权且含有上面

这个基矢，这个不可约成分便是$\overline{\rho^r}$。

以$S_r=\{p\}$表示基矢(26.1)的r个下标的置换群

$$p\psi_{i_1}\psi_{i_2}\cdots\psi_{i_r}=\psi_{i_{p(1)}}\psi_{i_{p(2)}}\cdots\psi_{i_{p(r)}} \qquad (26.4)$$

则可用运算（作用于空间$\mathscr{V}^r$上的算子）$\sum\limits_{p\in S_r}p$将(26.1)对称化，即

$$\sum_{p\in S_r}p\psi_{i_1}\psi_{i_2}\cdots\psi_{i_r} \qquad (26.5)$$

显然，若在n个基矢中，各ψ_1，ψ_2，…，ψ_n重复出现的次数相同，则由它们生成的矢量(26.5)是相同的；反之，则生成的(26.5)是线性独立的。所以独立的对称矢量(26.5)是与上述的一组重复数（填充数）$(r_1,r_2,\cdots,r_n)$一一对应的，并可用此数组为标记，将其写为

$$\Psi_{r_1r_2\cdots r_n}=\sum_{p\in S_r}p\psi_{i_1}\psi_{i_2}\cdots\psi_{i_r} \qquad (26.6)$$

由于

$$r_1+r_2+\cdots+r_n=r \qquad (26.7)$$

即独立的对称矢量(26.6)的个数等于将自然数r分为n个非负整数之和的分割数。由此可知，由(26.6)张成的$\mathscr{V}^r$的子空间$\mathscr{V}^{(r)}$的维数为

$$\dim\mathscr{V}^{(r)}=\binom{n+r-1}{r} \qquad (26.8)$$

$\mathscr{V}^{(r)}$中的每个矢量都是(26.6)的线性组合，而(26.6)在置换p下不变，从而有

$$p\Psi=\Psi \qquad \Psi\in\mathscr{V}^{(r)} \qquad (26.9)$$

反之，容易验证，$\mathscr{V}^r$中的每个在p下不变的矢量都可写为(26.6)的组合，因而属于子空间$\mathscr{V}^{(r)}$。所以$\mathscr{V}^{(r)}$是$\mathscr{V}^r$内全部对称张量构成的子空间。

由于$\mathscr{V}^r$上的算子p与表示ρ^r可易，即

$$\rho^r \hat{p} = \hat{p} \rho^r, \quad p \in S_r \tag{26.10}$$

并注意(26.9)，可以看出$\mathscr{V}^{(r)}$是表示ρ^r的不变子空间，有

$$\rho^r \Psi \in \mathscr{V}^{(r)}, \quad \Psi \in \mathscr{V}^{(r)} \tag{26.11}$$

将ρ^r在$\mathscr{V}^{(r)}$内的缩小记作$\rho^{(r)}$，则基矢(26.6)是$\rho^{(r)}$的属于权

$$r_1 m(1) + r_2 m(2) + \cdots + r_n m(n) \tag{26.12}$$

的本征矢。$\rho^{(r)}$的首权为$rm(1)$，唯一的本征矢

$$\Psi_{r,0,\cdots,0} = c\underbrace{\psi_1 \psi_1 \cdots \psi_1}_{r}$$

$\rho^{(r)}$ 一般也是可约的，它的以 $rm(1)$ 为首权的不可约成分为$\overline{\rho^{(r)}}$。

类似地，由(26.1)的反对称化，可以得到反对称基矢（以下假定$r \leqslant n$）

$$\Psi_{i_1, i_2, \cdots i_r} = \sum_{p \in S_r} \delta_p \hat{p} \psi_{i_1} \psi_{i_2} \cdots \psi_{i_r}, \quad i_1 < i_2 < \cdots < i_r \tag{26.13}$$

其中 $\delta_p = \pm 1$，正负号分别对应 p 为偶的和奇的。容易验证，等式(26.13)的右边对有重复下标的情况恒为零，而

$$\hat{p} \Psi_{i_1, i_2, \cdots, i_r} = \delta_p \Psi_{i_1, i_2, \cdots, i_r} \tag{26.14}$$

可见(26.13)已穷尽了(26.1)的独立的反对称组合。(26.13)张成$\mathscr{V}^r$的由所有反称矢量构成的子空间$\mathscr{V}^{[r]}$

$$\mathscr{V}^{[r]} = \{\Psi : \Psi \in \mathscr{V}^r, \ \hat{p}\Psi = \delta_p \Psi\} \tag{26.15}$$

由(26.10)知，$\mathscr{V}^{[r]}$也是ρ^r的不变子空间

$$\rho^r \Psi \in \mathscr{V}^{[r]}, \quad \Psi \in \mathscr{V}^{[r]} \tag{26.16}$$

将ρ^r在$\mathscr{V}^{[r]}$上的缩小记作$\rho^{[r]}$，则基矢(26.13)是$\rho^{[r]}$的属于权

$$m(i_1) + m(i_2) + \cdots + m(i_r) \tag{26.17}$$

的本征矢。如果ρ的权$m(i)$是按递降的顺序编号的

$$m(1) \geqslant m(2) \geqslant \cdots \geqslant m(n) \tag{26.18}$$

则$\rho^{[r]}$的首权为

$$m(1)+m(2)+\cdots+m(r) \qquad (26.19)$$

相应的唯一本征矢为

$$\Psi_{1,2,\cdots,r}=\sum_{p\in S_r}\delta_p p\psi_1\psi_2\cdots\psi_r$$

$\rho^{[r]}$中以(26.19)为首权的不可约成分记作$\overline{\rho^{[r]}}$。表示$\rho^{[r]}$的维数是

$$\dim\mathscr{V}^{[r]}=\binom{n}{r} \qquad (26.20)$$

26.3 单李代数的初等表示

每个l秩的单李代数共有l个基本表示，在这些表示的角图中，1个点（单纯根）上的标数为1，其余$(l-1)$个点上的标数都是零。在写法上，也可将零标数省去。一个单李代数的初等表示，是指标数1出现在角图端点上的基本表示。例如，A_l有两个初等表示（角图有两个端点），E_6有三个初等表示（其角图有三个端点）。

为了作出基本表示的角图，需先将其中的点（即所对应的单纯根）编号。在25.4节中，已经给出了典型李代数的单纯根系，其中对单纯根已经规定了序号；类似地也能从五个例外代数的根系（见24.5节）出发找出其单纯根系，并适当编号。将各单纯根的序号写在它们的邓金图的代表点的下面，便得图26.1。可见A_l的两个初等表示角图中的标数1分别在1点和l点上，可记作ρ_1和ρ_l；E_6的三个初等表示的角图中标数1分别在1，5，6点上，可记作ρ_1，ρ_5，ρ_6。

单李代数的邓金图的每个端点β，按一定的规则决定着图中的一串点（单纯根）

$$\beta_1=\beta,\ \beta_2,\ \cdots,\ \beta_k \qquad (26.21)$$

称为属于β的分支。所说的规则是：

1° 每个点$\beta_i(i=2,3,\cdots,k-1)$只与$\beta_{i-1}$和$\beta_{i+1}$相连，而不与图中的其他点相连；

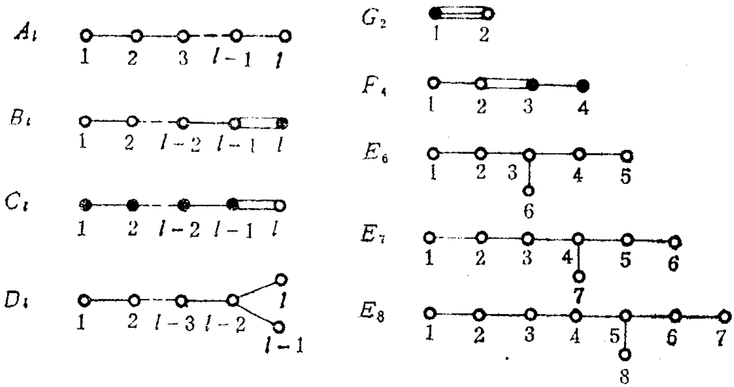
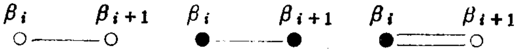


图 26.1 带有单纯根序号的邓金图

2° β_i和β_{i+1}之间以下列三种方式联接



而且如果是最后一种情形，定有$i+1=k$；

3° 在点串(26.21)中再增加一个点，则不可能仍满足1°和2°。

按这个定义，要从邓金图中找出属于某端点的分支，只需从这个端点出发，按1°和2°逐次确定下一个点，直到不可能再有下一个点为止，所得之点串便是要找的分支。由此，易找出各单代数的所有分支：

$$A_l\begin{cases}1,2,\cdots,l\\ l,l-1,\cdots,1\end{cases}\qquad G_2\begin{cases}1\\ 2\end{cases}$$

$$B_l\begin{cases}1,2,\cdots,l-1\\ l,l-1\end{cases}\qquad F_4\begin{cases}1,2\\ 4,3,2\end{cases}$$

$$C_l\begin{cases}1,2,\cdots,l\\ l\end{cases}\qquad E_6\begin{cases}1,2,3\\ 5,4,3\\ 6,3\end{cases}$$

$$D_l\begin{cases}1, 2, \cdots, l-2\\ l-1, l-2\\ l, l-2\end{cases}\qquad E_7\begin{cases}1, 2, 3, 4\\ 6, 5, 4\\ 7, 4\end{cases}$$

$$E_8\begin{cases}1, 2, 3, 4, 5\\ 7, 6, 5\\ 8, 5\end{cases}$$

标数1出现在角图任意点上的基本表示，能够由与此点共分支的端点所对应的那个初等表示来生成。即有下列定理。

定理 设β是单李代数$\mathscr{L}$的邓金图的一个端点,而$\beta_1=\beta$, β, …, β_k是β的分支，假定ρ_{ρ_i}是$\mathscr{L}$的标数1出现在点β_i上的那个基本表示，则有$\rho_{\beta_r}=\overline{\rho_\beta^{[r]}}$, $r=1, 2, \cdots, k$。

在证明这个定理之前，我们先来建立一种由不可约表示的首权逐次求出这个表示的所有权的方法(可简称逐次求权法)。假如已知$\mathscr{L}$的一个不可约表示ρ的首权M，则按25.4节之定理1，ρ的所有权都可写为

$$M-\alpha(i_1)-\alpha(i_2)-\cdots-\alpha(i_k),\ \alpha(i)\in\Pi$$

但这只是权的必要条件，能写为如上形状的$\mathscr{R}_l$中的矢量不一定是ρ的权。所以需要找到一种方法来鉴别其中的矢量到底是否是ρ的权。为此，我们将ρ的所有权加以分类（层），可写为

$$\begin{aligned}&M-\alpha(i)\\&M-\alpha(i_1)-\alpha(i_2)\\&\cdots\cdots\cdots\cdots\\&M-\alpha(i_1)-\alpha(i_2)-\cdots-\alpha(i_s)\end{aligned}$$

形状的权，分别称为1层的，2层的，…，s层的权。各层权的总和便是ρ的所有权（M本身可称零层权）。按下面的办法可以逐次求得各层的权。

先求1层的权。因M是首权，$M+\alpha(i)$不可能是权，所以M的$\alpha(i)$叙列中的$q=0$（见(25.25)式）。由(25.26)有

$$\frac{2(M,\alpha(i))}{(\alpha(i),\alpha(i))}=p$$

$M-\alpha(i)$ 在M的 $\alpha(i)$ 叙列中出现的充要条件是 $p>0$。因而$M-\alpha(i)$为权的判定条件是

$$\frac{2(M,\alpha(i))}{(\alpha(i),\alpha(i))}>0 \qquad (26.22)$$

据此足以确定1层的所有权$\{M-\alpha(i)\}$。

再求2层的权。每个2层的权$M-\alpha(i_1)-\alpha(i_2)$ 都可写成一个1层的权减去一个单纯根 $\alpha(i)$ 的形状，即 $M-\alpha(i_1)$ 和 $M-\alpha(i_2)$至少有一个是ρ的权。这是因为否则必有

$$\hat{E}_{-\alpha(i_1)}\psi_M=\hat{E}_{-\alpha(i_2)}\psi_M=0$$

从而有

$$\hat{E}_{-\alpha(i_2)}\hat{E}_{-\alpha(i_1)}\psi_M=\hat{E}_{-\alpha(i_1)}\hat{E}_{-\alpha(i_2)}\psi_M=0$$

于是 $M-\alpha(i_1)-\alpha(i_2)$ 也不是权（注意ρ的表示空间由形如(25.35)的矢量张成，只有对应于非零的(25.35)的(25.36)才是ρ的权）。所以，只需对每个1层的权$M^{(1)}$求形如

$$M^{(1)}-\alpha(i) \qquad (26.23)$$

的2层权。考虑权$M^{(1)}$的$\alpha(i)$列

$$M^{(1)}-p\alpha(i),\cdots,M^{(1)},\cdots,M^{(1)}+q\alpha(i)$$

设$M^{(1)}=M-\alpha(\imath)$，则有：当$\alpha(i)\neq\alpha(j)$时，$M^{(1)}+\alpha(i)=M-\alpha(j)+\alpha(j)$不是权（注意权的必要条件），因而有$q=0$；当$\alpha(i)=\alpha(j)$时，$M^{(1)}+\alpha(i)=M$ 是权，但 $M^{(1)}+(1+1)\alpha(i)=M+\alpha(i)$ 不是权，因而有 $q=1$。总之 $q(M^{(1)},\alpha(i))=\delta_{ij}$。所以$M^{(1)}-\alpha(i)$是权（它在上叙列中出现）的充要条件$p>0$可写为

$$\frac{2(M^{(1)},\alpha(i))}{(\alpha(i),\ \alpha(i))}>-q(M^{(1)},\alpha(i))=-\delta_{ij} \qquad (26.24)$$

对 1 层的每个权$M^{(1)}$都找出权$M^{(1)}-\alpha(i)$，便得出 2 层的全部权。

如已求得 s 层的权，便可用同样方法求得$s+1$层的权。每个$s+1$层的权都可写为

$$M^{(s)}-\alpha(i)' \qquad (26.25)$$

$M^{(s)}$是 s 层的一个权。如果将$M^{(s)}$的式子中的相同的项加以合并，可写为

$$M^{(s)}=M-\cdots-\mu_i\alpha(i)-\cdots$$

则$M^{(s)}+\alpha(i)$，$\cdots$，$M^{(s)}+\mu_i\alpha(i)$都是权，而$M^{(s)}+(\mu_i+1)\cdot\alpha(i)$不是。所以在$M^{(s)}$的$\alpha(i)$列中的 q 为

$$q(M^{(s)},\alpha(i))=\mu_i$$

从而$(M^{(s)}-\alpha(i))$为权的判定条件是$(p>0)$

$$\frac{2(M^{(s)},\alpha(i))}{(\alpha(i),\ \alpha(i))}>-q(M^{(s)},\alpha(i))=-\mu_i \qquad (26.26)$$

对 s 层的每个权$M^{(s)}$，作出一切满足(26.26)的$(M^{(s)}-\alpha(i))$，便得到$s+1$层的全部权。

因权的总数不超过 ρ 的维数，是有限的，这样作下去便将穷尽 ρ 的所有权。

现在回过来证明前面写出的定理。

证明 只需证明ρ_{β_γ}的首权与$\overline{\rho_\beta^{[\gamma]}}$的首权相等。设表示$\rho_\beta$的首权为$M$，则用逐次求权法不难作出$\rho_\beta$的其余的权。按表示$\rho_\beta$的定义，有

$$\frac{2(M,\alpha)}{(\alpha,\alpha)}=k_\alpha=\begin{cases}1，& 当\ \alpha=\beta_1\\ 0，& 当\ \alpha\neq\beta_1\end{cases}，\quad \alpha\in\Pi$$

由(26.22)可见，1 层的权只有$M-\beta_1$。容易算出

$$\frac{2(\beta_1,\alpha)}{(\alpha,\alpha)}=\begin{cases}2, & \text{当 } \alpha=\beta_1\\ -1, & \text{当 } \alpha=\beta_2\\ 0, & \text{当 } \alpha\neq\beta_1,\beta_2\end{cases}$$

这可由邓金图看出。所以有

$$\frac{2(M-\beta_1,\alpha)}{(\alpha,\alpha)}=\begin{cases}-1, & \text{当 } \alpha=\beta_1\\ 1, & \text{当 } \alpha=\beta_2 \quad \alpha\in\Pi\\ 0, & \text{当 } \alpha\neq\beta_1,\beta_2\end{cases}$$

（注意$(M-\beta,\alpha)=(M,\alpha)-(\beta,\alpha)$）。由(26.24)可见，2层的权只有$M-\beta_1-\beta_2$。可以一直继续作下去，$k$层也只有一个权$M-\beta_1-\beta_2-\cdots-\beta_k$。注意大于$k$的层的权都低于权$M-\beta-\cdots-\beta_k$，所以上面得到的权列

$$M,M-\beta,M-\beta_1-\beta_2,\cdots,M-\beta_1-\beta_2-\cdots-\beta_k$$

是表示ρ_β的按高度递降排列的前$(k+1)$个权。因此，表示$\rho_\beta^{[r]}$的最高权，即$\overline{\rho_\beta^{[r]}}$的首权为

$$\begin{aligned}&M+(M-\beta_1)+(M-\beta_1-\beta_2)+\cdots\\&+(M-\beta_1-\beta_2-\cdots-\beta_{r-1})\\=&rM-(r-1)\beta_1-(r-2)\beta_2-\cdots-\beta_{r-1}\\&\qquad(1\leqslant r\leqslant k)\end{aligned}$$

另一方面，如以M'表示上面的式子，则容易算出

$$\frac{2(M',\beta_i)}{(\beta_i,\beta_i)}=(r-i+1)-2(r-i)+(r-i-1)=0$$

$$(i=1,2,\cdots,r-2)$$

$$\frac{2(M',\beta_{r-1})}{(\beta_{r-1},\beta_{r-1})}=2-2=0$$

$$\frac{2(M',\beta_r)}{(\beta_r,\beta_r)}=1$$

$$\frac{2(M',\alpha)}{(\alpha,\alpha)}=0,\ \alpha\in\Pi,\ \alpha\neq\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_r$$

按ρ_{β_γ}的定义，上列诸式表明M'是ρ_{β_γ}的首权。这就证明了ρ_{β_γ}与$\overline{\rho_\beta^{[f]}}$有相同的首权$M'$。

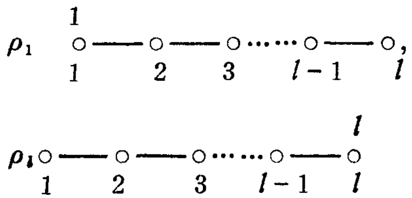
26.4 典型李代数的表示

利用前面的一般结果，原则上可以系统地构造出任意单李代数（从而半单李代数）的所有不可约表示。下面将针对典型李代数来说明上述的一般方法。对例外李代数的不可约表示的构造，可进行类似的处理。

A_l的不可约表示

1） 初等表示

A_l的两个初等表示$\rho_{10\cdots0}=\rho_1$和$\rho_{0\cdots0l}=\rho_l$



的首权分别为

$$M(1)=\frac{l}{l+1}e_1-\frac{1}{l+1}(e_2+e_3+\cdots+e_l) \qquad (26.27)$$

$$M(l)=\frac{1}{l+1}(e_1+e_2+\cdots+e_{l-1})-\frac{l}{l+1}e_l \qquad (26.28)$$

$\{e_i; i=1,2,\cdots,l+1\}$是$\mathscr{R}_{l+1}$的正交基$\left((e_i, e_j)=\frac{\delta_{ij}}{2(l+1)}\right)$。

因$sl(l+1)\cong A_l$是矩阵群，所以$sl(l+1)$本身就是A_l的自然表示（$l+1$维）。由(24.89)可写出H_i的矩阵

$$H_1=\begin{pmatrix} \frac{l}{l+1} & & & 0 \\ & -\frac{1}{l+1} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & -\frac{1}{l+1} \end{pmatrix}$$

$$H_2=\begin{pmatrix} -\frac{1}{l+1} & & & & 0 \\ & \frac{l}{l+1} & & & \\ & & -\frac{1}{l+1} & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & -\frac{1}{l+1} \end{pmatrix}$$

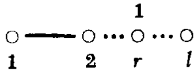
$$H_{l+1}=\begin{pmatrix} -\frac{1}{l+1} & & & & 0 \\ & -\frac{1}{l+1} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -\frac{1}{l+1} & \\ 0 & & & & \frac{l}{l+1} \end{pmatrix}$$

H_1，H_2，…，H_{l+1}张成$sl(l+1)$的嘉当子代数$\mathscr{H}$。可见，这个表示的首权恰为(26.27)。注意，写出权分量的基与表示根系的基是一致的，由(24.26)看出，这基即为$\{e_i\}$。因此，初等表示ρ_1即为（等价于）自然表示。

作ρ_1的对偶表示$-\tilde{\rho}_1$（$\tilde{\rho}$表ρ的转置），它的$H\in\mathscr{H}$的矩阵，与ρ_1的相应矩阵的转置只差一符号，可见此表示的首权为(26.28)。因此，初等表示ρ_l为自然表示的对偶表示。

2） 基本表示

由于属于每个端点的分支都包含全部点，所以只需从一个初等表示（对应一个端）出发，就能生成所有 l 个基本表示。记与点 r （单纯根 $\alpha(r)$ 相对应的基本表示为 $\rho_r=\rho_{0\cdots010\cdots0}$

ρ_r 

按26.2节的定理，有 $\rho_r=\overline{\rho_1^{[r]}}$。

我们来证明，表示 $\rho_1^{[r]}$ 是不可约的，于是 $\overline{\rho_1^{[r]}}=\rho_1^{[r]}$。上面写出的 $\rho_1(H)$ 的矩阵，其对角元是 ρ_1 的权分量。我们看到，$(l+1)$ 个权没有重复的，而表示的维数也是 $(l+1)$，可见 $(l+1)$ 个权都是单重的。事实上，如将矩阵 $\rho_1(H)$ 的第 i 个对角元所对应的权记为 $m(i)$，则有

$$m(1)=M(1)>m(2)>\cdots>m(l+1)$$

表示 $\rho_1^{[r]}$ 的权由(26.17)给出

$$m(i_1)+m(i_2)+\cdots+m(i_r),\quad i_1<i_2<\cdots<i_r$$

共有 $\binom{l+1}{r}$ 个，都是单重的，相应的唯一本征矢为(26.13)。$\rho_1^{[r]}$ 的首权为

$$m(1)+m(2)+\cdots+m(r)$$

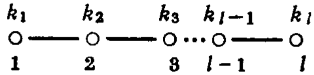
在25.3节中已经得知，A_l 的外尔群对其任意表示的权来说，就是权分量的置换群。由此便不难验证，$\rho_1^{[r]}$ 的每个权都能由首权经外尔群的操作得到。这又表明，$\rho_1^{[r]}$ 的权没有在外尔群下不变的真子集。于是可以推知，$\rho_1^{[r]}$ 是不可约的（注意25.3节的定理 1 之2°）。最后得基本表示

$$\rho_r=\rho_1^{[r]},\quad r=1,2,\cdots,l \tag{26.29}$$

已知 ρ_1 的基 $\{\psi_i\}$ 按 $sl(l+1)$ 的矩阵变换，从而由（26.13）就不难写出表示 $\rho_1^{[r]}$ 的矩阵。

3） 任意不可约表示

按26.1节的定理，A_l的任意表示

$\rho_{k_1k_2\cdots k_l}$ 

可由基本表示ρ_1，ρ_2，…，ρ_l造出

$$\rho_{k_1\cdots k_l}=\rho_1^{k_1}\otimes\rho_2^{k_2}\otimes\cdots\otimes\rho_l^{k_l}$$

以$M(i)$表基本表示ρ_i的首权，则$\rho_{k_1\cdots k_l}$的首权为

$$k_1M(1)+k_2M(2)+\cdots+k_lM(l) \qquad (26.30)$$

相应的本征矢量是

$$\underbrace{\Psi_1\cdots\Psi_1}_{k_1}\ \underbrace{\Psi_{12}\cdots\Psi_{12}}_{k_2}\cdots\underbrace{\Psi_{123\cdots l}\cdots\Psi_{123\cdots l}}_{k_l} \qquad (26.31)$$

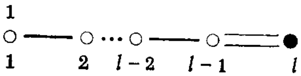
$\rho_{k_1\cdots k_l}$的表示空间中含有此基矢。另一方面，注意到(26.13)，此矢量显然属于张量空间

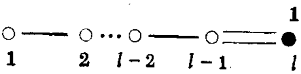
$$\mathscr{V}^{k_1}\otimes\mathscr{V}^{2k_2}\otimes\cdots\otimes\mathscr{V}^{lk_l}=\mathscr{V}^{k_1+2k_2+\cdots+lk_l}$$

因此，$\rho_{k_1\cdots k_l}$的表示空间是$\mathscr{V}^\nu(\nu=k_1+2k_2+\cdots+lk_l)$的含有基矢(26.31)的不可约子空间。于是，构造表示$\rho_{k_1\cdots k_l}$的问题便被简化为：将ρ_1的表示空间$\mathscr{V}$的ν次直幂空间$\mathscr{V}^\nu$ $\left(\nu=\sum_{i=1}^{l}ik_i\right)$（$\rho^\nu$的表示空间）约化并定出含有基矢(26.31)的不可约子空间。

B_l的不可约表示

$l\geqslant2$时，B_l的两个初等表示

ρ_1 

ρ_l 

的首权分别为（见(25.63)式）

$$M(1)=e_1 \qquad (26.32)$$

$$M(l)=\frac{1}{2}(e_1+e_2+\cdots+e_l) \qquad (26.33)$$

B_l的自然表示是$so(2l+1,C)$，这是典型群$SO(2l+1,C)$的李代数。这个群是$(2l+1)$维复空间上的正交算子群，它保持一个双线性形不变（见24.7节）。但它作为矩阵群的同构形式并不是唯一的。当空间的基取为正交归一基时，这些算子的矩阵是正交矩阵，有

$$\tilde{T}T=I$$

于是这个群成为正交矩阵群，而其李代数便是所有反对称矩阵的代数

$$so(2l+1,C)=\{A:\tilde{A}=-A\} \qquad (26.34)$$

由于这些矩阵A的对角元都是零，不能直接用对角矩阵来表示嘉当子代数，故通常不采取这种形式。为了得到$SO(2l+1,C)$的其他矩阵形式，考虑正交算子$\hat{T}$在任意基下的矩阵

$$T_1=S^{-1}TS$$

其中T是$\hat{T}$在正一基下的正交矩阵，S是由正一基到任取基的基矢变换矩阵。显然有

$$\tilde{T}_1=(\tilde{S}S)T_1^{-1}(\tilde{S}S)^{-1}$$

或

$$\tilde{T}_1=KT_1^{-1}K^{-1}$$

其中$K=\tilde{S}S$是任意满秩的对称方阵($\tilde{K}=K$)。所以群$SO(2l+1,C)$的一般的矩阵形式可写为

$$SO(2l+1,C)=\{A:\tilde{A}=KA^{-1}K^{-1},\ \det K\neq 0,\tilde{K}=K\}$$

其李代数的相应矩阵形式为（经指数映射）

$$so(2l+1,C)=\{A:\tilde{A}=-KAK^{-1},\ \det K\neq 0,\tilde{K}=K\}$$

当取$K=I$时，便得(26.34)。现在取

$$K=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & I_l\\ 0 & I_l & 0\end{pmatrix} \qquad (26.35)$$

其中I_l是$l\times l$的单位方阵，则得所需要的矩阵代数

$$so(2l+1,C)=\{A: \tilde{A}K+KA=0\} \qquad (26.36)$$

由(26.35)和(26.36)可得到(26.36)的矩阵A有一般形状（按(26.35)的方式分块）

$$A=\begin{pmatrix} 0 & A_1 & A_2 \\ -\tilde{A}_2 & A_3 & A_4 \\ -\tilde{A}_1 & A_5 & -\tilde{A}_3 \end{pmatrix},\quad \tilde{A}_4=-A_4,\quad \tilde{A}_5=-A_5 \qquad (26.37)$$

据此，$so(2l+1,C)$的标准基可取为：

l 个$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_3 & 0 \\ 0 & 0 & -\tilde{A}_3 \end{pmatrix}$形的对角矩阵

$$H_i=X_{ii}-X_{l+i,l+i} \quad i=2,3,\cdots,l+1 \qquad (26.38)$$

以及(l^2-l)个非对角矩阵

$$E_{ij}=X_{ij}-X_{l+j,l+i} \quad 2\leqslant i\neq j\leqslant l+1 \qquad (26.39)$$

$\frac{l^2-l}{2}$个$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$形的矩阵

$$E'_{ij}=X_{i,l+j}-X_{j,l+i} \quad 2\leqslant i<j\leqslant l+1 \qquad (26.40)$$

$\frac{l^2-l}{2}$个$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_5 & 0 \end{pmatrix}$形的矩阵

$$E''_{ij}=X_{l+i,j}-X_{l+j,i} \quad 2\leqslant j<i\leqslant l+1 \qquad (26.41)$$

l 个$\begin{pmatrix} 0 & A_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -\tilde{A}_1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$形的矩阵

$$E'_i=X_{1i}-X_{l+i,1} \quad 2\leqslant i\leqslant l+1 \qquad (26.42)$$

$$l\text{个}\begin{pmatrix} 0 & 0 & A_2 \\ -\tilde{A}_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\text{形的矩阵}$$

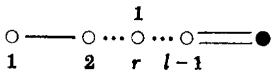
$$E''_i = X_{1,l+i} - X_{i1} \quad 2 \leqslant i \leqslant l+1 \qquad (26.43)$$

其中 X_{ij} 仍表第 i 行 j 列的元素为1而其余元素皆为零的 $(2l+1)$阶方阵。$\{H_i\}$ 张成 l 维的嘉当子代数，E_{ij} 属于根 $\pm(e_i - e_j)$（$i<j$时取正号，反之取负号），E'_{ij}和E''_{ij}分别属于根(e_i+e_j)和$-(e_i+e_j)$，E'_i和E''_i分别属于根$-e_i$和e_i。由(26.38)容易看出，自然表示的权($2l+1$个)为

$$0, \ \pm e_1, \ \pm e_2, \ \cdots, \ \pm e_l$$

都是单重的。显然首权是e_1，与ρ_1的首权(26.32)相同。所以，B_l的初等表示ρ_1即是（等价于）B_l的自然表示。

B_l的基本表示

ρ_r 

可由ρ_1造出：$\rho_r = \overline{\rho_1^{[r]}}$ $\quad (r=1, 2, \cdots, l-1)$

B_l的另一初等表示ρ_l，首权为(26.33)。由 B_l 的外尔群可作出与首权等价的权

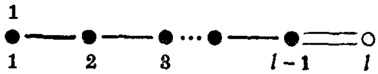
$$\frac{1}{2}(\pm e_1 \pm e_2 \pm \cdots \pm e_l) \qquad (26.43)$$

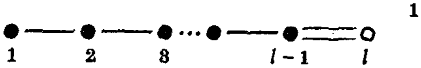
（见25.3节）。可以证明，(26.43)包含了 ρ_l 的所有的权。注意到这2^l个权都是单重的，可知ρ_l是一个2^l维的表示。这个表示称为旋量表示，其构造方法没有其他基本表示那样简单，但由首权易得下列关系

$$\overline{\rho_l^2} = \overline{\rho_1^{[l]}}, \quad \overline{\rho_l^{[2]}} = \overline{\rho_1^{[l-1]}} \qquad (26.44)$$

C_l的不可约表示

$l \geqslant 2$时，C_l有两个初等表示

ρ_1 

ρ_l 

由于$\alpha(l)$（端点 l ）也属于$\alpha(1)$（端点 1 ）的分支，C_l的所有基本表示可只由一个初等表示ρ_1来生成

$$\rho_r = \overline{\rho_1^{[r]}}, \quad r = 1, 2, \cdots, l \qquad (26.45)$$

而ρ_1即是（等价于）C_l的自然表示$sp(2l,C)$。$sp(2l,C)$ 是辛群 $S_p(2l,C)$ 的李代数。辛群由使一个二次形不变的矩阵组成（见24.7节），即由满足下列条件的矩阵T组成

$$\tilde{T}KT = K$$

$$K = \begin{pmatrix} 0 & I_l \\ -I_l & 0 \end{pmatrix} \qquad (26.46)$$

所以有（经指数映射）

$$sp(2l,C) = \{A: \tilde{A}K + KA = 0\} \qquad (26.47)$$

从而可得$sp(2l,C)$的元的一般形状为

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ A_3 & -\tilde{A}_1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{A}_2 = A_2, \quad \tilde{A}_3 = A_3 \qquad (26.48)$$

据此，$sp(2l,C)$的标准基可取为：

l 个$\begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & -\tilde{A}_1 \end{pmatrix}$形的对角矩阵

$$H_i = X_{ii} - X_{l+i,l+i} \quad i = 1, 2, \cdots, l \qquad (26.49)$$

以及$(l^2 - l)$个非对角矩阵

$$E_{ij} = X_{ij} - X_{l+j,l+i} \quad (1 \leqslant i \neq j \leqslant l) \qquad (26.50)$$

$l + \dfrac{l^2 - l}{2}$个$\begin{pmatrix} 0 & A_2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$形的矩阵

$$E'_i = X_{i,l+i} \quad (1 \leqslant i \leqslant l) \qquad (26.51)$$

$$E'_{ij}=X_{i,l+j}+X_{j,l+i}\quad(1\leqslant i<j\leqslant l)\qquad(26.52)$$

$l+\frac{l^2-l}{2}$个$\begin{pmatrix}0 & 0\\ A_3 & 0\end{pmatrix}$形的矩阵

$$E''_i=X_{l+i,i},\ (1\leqslant i\leqslant l)\qquad(26.53)$$

$$E''_{ij}=X_{l+i,j}+X_{l+j,i},\ (1\leqslant i<j\leqslant l)\qquad(26.54)$$

$\{H_i\}$张成 l 维的嘉当子代数，E_{ij}属于根$\pm(e_i-e_j)$（$i<j$ 时取正号，$i>j$时取负号），E'_i 和E''_i分别属于根 $2e_i$ 和 $-2e_i$，E'_{ij}和E''_{ij}分别属于根(e_i+e_j)和$-(e_i+e_j)$。可见，这个自然表示的权为

$$\pm e_1,\ \pm e_2,\ \cdots,\ \pm e_l$$

（$2l$ 个），都是单重的。首权$M(1)=e_1$与ρ_1的首权（见(25.66)）相同。这就证明了ρ_1是C_l的自然表示。

D_l 的不可约表示

D_l 的自然表示是 $so(2l,C)$。与B_l的情形类似地有

$$so(2l,C)=\{A;\ \tilde{A}K+KA=0\}\qquad(26.55)$$

$$K=\begin{pmatrix}0 & I_l\\ I_l & 0\end{pmatrix}\qquad(26.56)$$

矩阵A的一般形状为

$$A=\begin{pmatrix}A_1 & A_2\\ A_3 & -\tilde{A}_1\end{pmatrix},\ \tilde{A}_2=-A_2,\ \tilde{A}_3=-A_3\qquad(26.57)$$

$so(2l,C)$的标准基可取为

l 个$\begin{pmatrix}A_1 & 0\\ 0 & -\tilde{A}_1\end{pmatrix}$形的对角矩阵

$$H_i=X_{ii}-X_{l+i,l+i},\ (1\leqslant i\leqslant l)\qquad(26.58)$$

及(l^2-l)个非对角矩阵

$$E_{ij}=X_{ij}-X_{l+j,l+i},\ (1\leqslant i\neq j\leqslant l)\qquad(26.59)$$

$\frac{l^2-l}{2}$个$\begin{pmatrix} 0 & A_2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$形的矩阵

$$E'_{ij}=X_{i,l+j}-X_{j,l+i}, \quad (1\leqslant i<j\leqslant l) \qquad (26.60)$$

$\frac{l^2-l}{2}$个$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A_3 & 0 \end{pmatrix}$形的矩阵

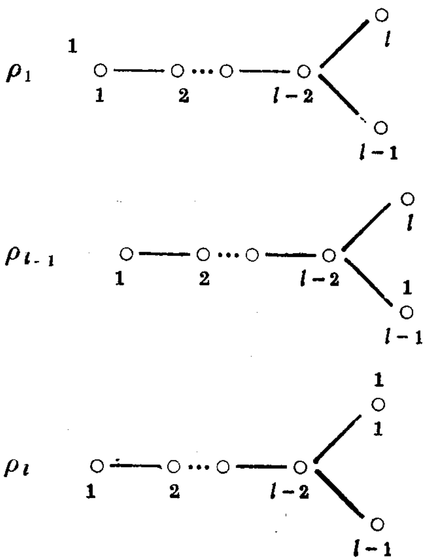
$$E''_{ij}=X_{l+i,j}-X_{l+j,i}, \quad (1\leqslant j<i\leqslant l) \qquad (26.61)$$

$\{H_i\}$张成 l 维嘉当子代数，E_{ij}属于根$\pm(e_i-e_j)$($i<j$ 时取正号，$i>j$ 时取负号），E'_{ij}属于根（e_i+e_j），E''_{ij}属于根$-(e_i+e_j)$。可见自然表示的权为

$$\pm e_1, \ \pm e_2, \ \cdots, \ \pm e_l$$

都是单重的，首权为e_1。

D_l有三个初等表示，与其邓金图的三个端点相对应。它们是($l\geqslant 4$)



由(25.69)，它们的首权分别为

$$M(1)=e_1 \tag{26.62}$$

$$M(l-1)=\frac{1}{2}(e_1+e_2+\cdots+e_{l-1})-\frac{1}{2}e_l \tag{26.63}$$

$$M(l)=\frac{1}{2}(e_1+e_2+\cdots+e_l) \tag{26.64}$$

(26.62)表明，ρ_1即是（等价于）D_l 的自然表示。由ρ_1可生成$(l-2)$个基本表示（注意属于端点 1 的分支）

$$\rho_r=\overline{\rho_1^{[r]}},\quad r=1,2,\cdots,l-2 \tag{26.65}$$

D_l 的另外两个初等表示ρ_{l-1}和ρ_l称为旋表示。这两个表示的权都可由首权经外尔群得出，ρ_{l-1}的权为将(26.64)中的奇数个正号改为负号，ρ_l的权为将(26.64)中的偶数个正号改为负号。权的数目都是 2^{l-1}，且都是单重权（与首权等价），故ρ_l和 ρ_{l-1}的维数都是2^{l-1}。显然有

$$\overline{\rho_{l-1}^{[2]}}\sim\overline{\rho_l^{[2]}}\sim\overline{\rho_1^{[l-2]}} \tag{26.66}$$

$$\overline{\rho_{l-1}\otimes\rho_l}\sim\overline{\rho_1^{[l-1]}} \tag{26.67}$$

§ 27 卡塞米尔(Casimir)算子和特征标

27.1 半单李群（李代数）的卡塞米尔算子

在§22中我们对$SU(2)$和$SO(3)$群引入了角动量算子$(\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3)$或$(\hat{J}_+, \hat{J}_-, \hat{J}_3)$，由它们生成了群的表示。25.1节中的讨论表明，角动量算子是$SU(2)$或其复扩充$SL(2)$的李代数的标准基的算子（作用于表示空间）。$\hat{J}_3$是嘉当子代数(1维)的基 H_1 的算子，它的本征值便是表示的权。我们看到，在不可约表示 $D^{(J)}$ 中，$\hat{J}_3$的矩阵有对角形（见(21.21)或(25.8)中的$\hat{H}_1^J$）

$$\begin{pmatrix} J & & & & \\ & J-1 & & & \\ & & J-2 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & -J \end{pmatrix}$$

可见表示$D^{(J)}$的权为

$$J,\ J-1,\ J-2,\ \cdots,\ -J$$

J为首权。因而不可约表示$D^{(J)}$的标记J实为其首权。另一方面，J又是角动量平方算子$\hat{J}^2$的量子数。在22.2节中讨论过了J的后一种意义，已表明$D^{(J)}$的表示空间是$\hat{J}^2$的属于本征值

$$\lambda = J(J+1)$$

的本征子空间；而算子$\hat{J}^2$为李代数$sl(2)$基的算子的二次形

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2 = \frac{1}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+) + \hat{J}_3^2$$

这一情形可以推广到一般的半单李群中去。

设$\mathscr{L}$为半单李群G的李代数，$\{X_\rho\}$是G的一组生成元，亦即$\mathscr{L}$的一组基；设$\mathscr{L}$的度规张量(逆变分量)为$g^{\rho\sigma}$；在$\mathscr{L}$的任意表示中X_ρ的算子为$\hat{X}_\rho$。定义作用于表示空间上的算子：

$$\hat{C} = g^{\rho\sigma}\hat{X}_\rho\hat{X}_\sigma \tag{27.1}$$

称为G或$\mathscr{L}$的卡塞米尔算子。注意到$g^{\rho\sigma}$的张量性质，$\hat{C}$显然与$\mathscr{L}$的基$\{X_\rho\}$之选取无关。$\hat{C}$的基本性质是与表示的所有算子可易，即

$$[\hat{C},\ \hat{X}] = 0,\quad X \in \mathscr{L} \tag{27.2}$$

为证明上式，只须证明$\hat{C}$与所有$\hat{X}_\tau$可易，X_τ是$\mathscr{L}$的基矢。

$$\begin{aligned}
[\hat{C},\hat{X}_\tau] &= g^{\rho\sigma}[\hat{X}_\rho\hat{X}_\sigma,\hat{X}_\tau] \\
&= g^{\rho\sigma}[\hat{X}_\rho,\hat{X}_\tau]\hat{X}_\sigma + g^{\rho\sigma}\hat{X}_\rho[\hat{X}_\sigma,\hat{X}_\tau] \\
&= g^{\rho\sigma}c_{\rho\tau}^{\lambda}\hat{X}_\lambda\hat{X}_\sigma + g^{\rho\sigma}c_{\sigma\tau}^{\lambda}\hat{X}_\rho\hat{X}_\lambda \\
&= g^{\rho\sigma}c_{\rho\tau}^{\lambda}\hat{X}_\lambda X_\sigma + g^{\sigma\rho}c_{\rho\tau}^{\lambda}\hat{X}_\sigma\hat{X}_\lambda \\
&= g^{\rho\sigma}c_{\rho\tau}^{\lambda}(\hat{X}_\lambda\hat{X}_\sigma + \hat{X}_\sigma\hat{X}_\lambda) \\
&= g^{\rho\sigma}g^{\lambda\mu}c_{\rho\tau\mu}(\hat{X}_\lambda\hat{X}_\sigma + \hat{X}_\sigma\hat{X}_\lambda)
\end{aligned}$$

因$c_{\rho\tau\mu}$是对所有下标反称的（见24.3节），而括号内的因子对指标λ和σ是对称的，度规张量是对称的，这要求上式改变符号之后不变，故必为零

$$[\hat{C},\hat{X}_\tau]=0 \tag{27.3}$$

由舒尔引理，算子$\hat{C}$在任意不可约子空间上的作用(缩小)等于单位算子的常数倍。换言之，G（或$\mathscr{L}$）的不可约表示空间必为$\hat{C}$的本征子空间。由于不可约表示（空间）是以其首权M为标记的，因而在以M为标记的不可约表示空间上$\hat{C}$的本征值必为M的函数，即

$$\lambda=f(M) \tag{27.4}$$

在$SL(2)$的情形，$\hat{C}\propto\hat{J}^2$，而$f(M)\propto M(M+1)$。对一般的半单李群（李代数），函数f的具体形式可如下求出。

在$\mathscr{L}$的标准基下，结构常数具有较简单的形式(24.56)，而度规张量$g_{\rho\sigma}$有性质（关于标准的正交性引理）

$$g_{\alpha,\sigma}=0,\quad \sigma\neq-\alpha \tag{27.5}$$

$$g_{\alpha,-\alpha}=1 \tag{(24.33)}$$

从而$g_{\rho\sigma}$的矩阵有下形

$$(g_{\rho\sigma})=\begin{pmatrix} g_{ij} & & & 0 \\ & \begin{matrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{matrix} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \begin{matrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{matrix}\end{pmatrix} \tag{27.6}$$

由此又知其逆矩阵为

$$(g^{\rho\sigma})=\begin{pmatrix} g^{ij} & & & 0 \\ & \begin{matrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{matrix} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \begin{matrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{matrix}\end{pmatrix} \tag{27.7}$$

其中子阵(g^{ij})是(g_{ij})的逆。注意$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 = I \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$。因而度规张量之逆变分量也有

$$g^{\alpha,\sigma}=0, \quad \sigma\neq-\alpha \tag{27.8}$$

$$g^{\alpha,-\alpha}=1 \tag{27.9}$$

由以上两式，可将$\hat{C}$在标准基下的形式写为

$$\hat{C}=g^{ij}\hat{H}_i\hat{H}_j+\sum_{\alpha}\hat{E}_\alpha\hat{E}_{-\alpha} \tag{27.10}$$

在以M为首权的不可约表示的空间中，取属于M的本征矢ψ_M。将$\hat{C}$作用于ψ_M，并注意对任意正根α有$\hat{E}_\alpha\psi_M=0$(否则M不是首权)，因而有$\sum\limits_{\alpha}\hat{E}_\alpha\hat{E}_{-\alpha}=\sum\limits_{\alpha^+}(\hat{E}_\alpha\hat{E}_{-\alpha}+\hat{E}_{-\alpha}\hat{E}_\alpha)$，$\sum\limits_{\alpha}\hat{E}_\alpha\hat{E}_{-\alpha}\psi_M=\sum\limits_{\alpha^+}\hat{E}_\alpha\hat{E}_{-\alpha}\psi_M=\sum\limits_{\alpha^+}(\hat{E}_\alpha\hat{E}_{-\alpha}-\hat{E}_{-\alpha}\hat{E}_\alpha)\psi_M=\sum\limits_{\alpha^+}[\hat{E}_\alpha,\hat{E}_{-\alpha}]\psi_M$，可得

$$\begin{aligned}\hat{C}\psi_M&=g^{ij}M_iM_j\psi_M+\sum_{\alpha^+}[\hat{E}_\alpha,\hat{E}_{-\alpha}]\psi_M\\&=[(M,M)+\sum_{\alpha^+}\alpha^i\hat{H}_i]\psi_M\\&=[(M,M)+\sum_{\alpha^+}(\alpha,M)]\psi_M\end{aligned}$$

由此得出

$$f(M)=(M,M)+\sum_{\alpha^+}(\alpha,M) \tag{27.11}$$

其中$\sum\limits_{\alpha^+}$表示对所有正根求和。引入正根之和之半矢量

$$\delta=\frac{1}{2}\sum_{\alpha^+}\alpha \tag{27.12}$$

又可得

$$f(M)=(M,M)+2(\delta,M)=(M+\delta)^2-\delta^2 \tag{27.13}$$

总之，$G(\mathscr{L})$的卡塞米尔算子(27.1)或(27.10)以$G(\mathscr{L})$的不可约表示空间为本征子空间，相应的本征值是不可约表示的首权的函数，并由(27.11)或(27.13)给出。

对典型群，由它们的根系（见24.5节）容易算出正根之和之半为

$$A_l: \quad \delta = \sum_{i=1}^{l+1}\left(\frac{l}{2} - i + 1\right)e_i \tag{27.14}$$

$$B_l: \quad \delta = \sum_{i=1}^{l}\left(l - i + \frac{1}{2}\right)e_i \tag{27.15}$$

$$C_l: \quad \delta = \sum_{i=1}^{l}(l - i + 1)e_i \tag{27.16}$$

$$D_l: \quad \delta = \sum_{i=1}^{l}(l - i)e_i \tag{27.17}$$

代入(27.13)，并注意(24.70)等式子，便可得典型群的卡塞米尔算子的本征值（用首权在基$\{e_i\}$下的分量来表达）公式

$$A_l: \quad \lambda = \frac{1}{2(l+1)}\sum_{i=1}^{l+1} M_i(M_i + l - 2i + 2) \tag{27.18}$$

$$B_l: \quad \lambda = \frac{1}{2(2l-1)}\sum_{i=1}^{l} M_i(M_i + 2l - 2i + 1) \tag{27.19}$$

$$C_l: \quad \lambda = \frac{1}{4(l+1)}\sum_{i=1}^{l} M_i(M_i + 2l - 2i + 2) \tag{27.20}$$

$$D_l: \quad \lambda = \frac{1}{4(l-1)}\sum_{i=1}^{l} M_i(M_i + 2l - 2i) \tag{27.21}$$

(27.4)表明，每个首权M决定卡塞米尔算子的一个本征值λ。反之，$\hat{C}$的一个本征值不能决定一个首权，因为不能期望单由一个数λ去充分确定l个独立数$M=(M_1, M_2, \cdots, M_l)$。如果除$\hat{C}$外，还有$(l-1)$个作用于表示空间上的算子$\hat{C}_2$，$\hat{C}_3, \cdots$，$\hat{C}_l$，与$\hat{C}_1=\hat{C}$一起构成$l$个独立的互易算子，并且它们与$\mathscr{L}$的表示的所有算子可易，则$\mathscr{L}$的不可约表示空间将是这$l$个算子的共同本征子空间，相应的本征值仍是不可约表示的首权的函数

$$\begin{cases}\lambda_1=f_1(M)\\ \lambda_2=f_2(M)\\ \lambda_3=f_3(M)\\ \cdots\cdots\\ \lambda_l=f_l(M)\end{cases}\tag{27.22}$$

这样的一组本征值 $\lambda=(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_l)$ 可以由上式单值地决定首权M，从而也就决定了不可约表示。这就提供了标记不可约表示的另一种更明白的方案：以算子$(\hat{C}_1,\hat{C}_2,\cdots,\hat{C}_l)$的共同本征值 $\lambda=(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_l)$ 作为$\mathscr{L}$的不可约表示的标记；以 λ 为标记的不可约表示空间是这组算子的属于本征值 λ 的共同本征子空间。但具体构造这些算子，并计算它们的本征值谱，是困难的。不过，拉卡已经证明：对每一 l 秩的半单李群，存在一组 l 个算子$(\hat{C}_1,\hat{C}_2,\cdots,\hat{C}_l)$，每个算子都是 $(\hat{X}_1,\hat{X}_2,\cdots,\hat{X}_n)$ 的函数，且与 $\{\hat{X}_\rho\}$ 可易，它们的共同本征值单值地刻划群的不可约表示（其中$\{X_\rho\}$为$\mathscr{L}$的基）。

27.2 紧致半单李群的共轭元素类

先来考虑群$SU(n)$的类。我们知道，幺正矩阵恒可由幺正矩阵产生的相似变换对角化，因而也能由单模的幺正矩阵 $(S/\det S)$ 产生的相似变换对角化。所以，对任意$g\in SU(n)$，都有$h\in SU(n)$，使hgh^{-1}有对角形。但e^v有对角形的充要条件是 v 有对角形，而两者的对角元也是指数关系。又由 $su(n)$ 的基(24.104)知，$v\in su(n)$有对角形的充要条件为

$$v=\sum_{i=1}^{l}H'_i\varphi_i=i\sum_{k=1}^{l}H_k\varphi_k\quad(i=\sqrt{-1})$$

φ_1，φ_2，$\cdots$，φ_l 是实参数，$l=n-1$ 是 $SU(n)$ 的秩。因而，$SU(n)$的任意元（矩阵）必共轭于一个形如

$$e^{i(H_1\varphi_1+\cdots+H_l\varphi_l)}=e^{iH_1\varphi_1}\cdot e^{iH_2\varphi_2}\cdots e^{iH_l\varphi_l}\tag{27.23}$$

的元。其中$\{H_1,H_2,\cdots,H_l\}$是 $sl(n)$ 的嘉当子代数（也是极

大可换子代数）的基，因而$\{H'_1,H'_2,\cdots,H'_l\}$便是 $su(n)$ 的极大可换子代数的基。因而形如(27.23)的矩阵的全体构成$SU(n)$的极大可换紧李子群。既然$SU(n)$的每个类中都有一个(27.23)形的元，就可取这种元为类的代表元，因而$SU(n)$的类依赖于$l=n-1$个连续参数。

上述情形可以推广到一般的紧半单李群上去。设G是一个紧半单李群，$\mathscr{L}$ 是它的李代数。若 G_0 是G的极大可换紧李子群，则可以证明[13]，G 的每个类中都有属于G_0的元。设群 G 的秩为 l ，则$\mathscr{L}$的极大可换子代数是 l 维的；设这个子代数的基为$\{H'_1,H'_2,\cdots,H'_l\}$，则$G_0$的元可写为

$$g_0(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_l)=e^{H'_1\varphi_1+H'_2\varphi_2+\cdots+H'_l\varphi_l} \tag{27.24}$$

注意到诸H_k互易，上式又可写为

$$\begin{cases} g_0(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_l)=g_1(\varphi_1)g_2(\varphi_2)\cdots g_l(\varphi_l) \\ g_k(\varphi_k)=e^{H'_k\varphi_k} \end{cases} \tag{27.25}$$

显然每个 $g_k(\varphi_k)$ 生成 G_0 的一个单参数子群。可以取 G_0 的元(27.24)作为G的类的代表元。可见G的类依赖于 l 个（实）参数$(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_l)$ ；而G的任意类函数都是这 l 个参数的函数，特别地，G的任意表示的特征标可写为$(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_l)$ 的函数。

27.3 紧致半单李群的单纯特征标

设G为紧半单李群，$\mathscr{L}$是G的李代数，$\mathscr{L}$ 的复扩充为$\mathscr{L}_c$ ($\mathscr{L}$是$\mathscr{L}_c$的紧实形，$\mathscr{L}_c$ 是$\mathscr{L}$标准基的复系数组合的集合，由$\mathscr{L}_c$的标准基经变换(24.104)可得$\mathscr{L}$的基，$\mathscr{L}$ 是这 组基的实系数组合的集合)。设 $\hat{g}=A(g)(g\in G)$是G的一个不可约表示，则按上节的结果，这个表示的特征标可写为

$$\chi(g)=\mathrm{tr}A(g)=\mathrm{tr}A(g_0)=\mathrm{tr}e^{\sum_1^l \hat{H}'_k\varphi_k}$$

或

$$\chi(g)=\chi(g_0)=\mathrm{tr}e^{i\sum_1^l \hat{H}_k\varphi_k} \tag{27.26}$$

$\{H_k\}$是$\mathscr{L}_c$的嘉当子代数的基。按25.3节的定理2，表示空间的基可取为$\{\hat{H}_k\}$的共同本征矢，相应的本征值便是表示的权，属于同一权的基矢数便是这个权的重数。显然，在这样的基下，算子$e^{i\Sigma\hat{H}_k\varphi_k}$的矩阵是对角的，对角元由数$e^{i\Sigma m_k\varphi_k}$组成，且其出现次数等于权$m=(m_1,m_2,\cdots,m_l)$的重数$\gamma_m$。所以(27.26)可写为

$$\chi(\varphi)=\sum_m\gamma_m e^{im_k\varphi^k}=\sum_m\gamma_m e^{i(m,\varphi)} \tag{27.27}$$

在上式中已将φ_k改写为φ^k，这样可表明$\{\varphi^k\}$作为$\mathscr{L}_c$的嘉当子代数$\mathscr{H}$中元的坐标，在基$\{H_k\}$变换时，是与基逆变的，同时可将$\Sigma H_k\varphi^k$中的和号略去；$\varphi=(\varphi^1,\varphi^2,\cdots,\varphi^l)$，注意$\{m_k\}$是与$\{H_k\}$协变的，$(m,\varphi)=m_k\varphi^k$实为$\mathscr{L}_c$的根系所张成的$\mathscr{R}_l$空间中的标积。当$\mathscr{H}$的基$\{H_k\}$的选择变换时，$(m,\varphi)$是不变量，所以公式(27.27)的形式与坐标系的选取无关。

特征标公式(27.27)尽管形式简单，但因它依赖于表示的所有权及其重数，而这些因素通常是未知的，所以并不是一个实用的公式。事实上，G的不可约表示是由首权决定的，因而特征标也应由首权决定。仅依赖于表示的首权的特征标公式是外尔导出的，推演较复杂[15]，下面给出其结果。

设$\mathscr{L}_c$的外尔群为W，S表W的元，δ_S表S（空间$\mathscr{R}_l$中的正交变换）的行列式$\delta_S=\det S=1$或-1；以M为首权的不可约表示特征标的外尔公式是

$$\chi_M(\varphi)=\frac{\sum_{S\in W}\delta_S\cdot e^{i(S(M+\delta),\varphi)}}{\sum_{S\in W}\delta_S\cdot e^{i(S\delta,\varphi)}} \tag{27.28}$$

其中 δ 为$\mathscr{L}_c$的正根之和之半，SK表$\mathscr{R}_l$中的矢量K经S作用后变成的矢量，(,)仍是$\mathscr{R}_l$中的标积符号。

为了便于理解外尔公式的含义，现将它用于典型群$SU(n)$。$SU(n)$ 的李代数为$\mathscr{L}=su(n)$，其复扩充为$\mathscr{L}_c=sl(n)\cong A_{n-1}$。在27.1节中已算出了$A_l=A_{n-1}$的 δ 为(27.14)

$$\delta=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{n}{2}-i+\frac{1}{2}\right)e_i$$

而

$$M+\delta=\sum_{i=1}^{n}\left(M_i+\frac{n}{2}-i+\frac{1}{2}\right)e_i$$

令

$$l_i^0=\frac{n+1}{2}-i \tag{27.29}$$

$$l_i=M_i+\frac{n+1}{2}-i \tag{27.30}$$

则可将前面两式写为

$$\delta=\sum_{i=1}^{n}l_i^0e_i,\quad M+\delta=\sum_{i=1}^{n}l_ie_i$$

(25.27)和(25.34)表明A_{n-1}的外尔群的生成元S_a对 $\mathscr{R}_l$ 中的任意矢量的作用是对换该矢量在($\mathscr{R}_{l+1}$的)基$\{e_i\}$下的两个分量。又反映S_a的矩阵显然相似于$\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & I_{l-1}\end{pmatrix}$，所以$\delta_{S_a}=-1$。因而，外尔群$W$的一般元$S$是对$\mathscr{R}_l$中矢量的 $\{e_i\}$ 分量的任意置换，而 $\delta_S=\pm1$ 取决于S是偶或奇置换。记住这一点便可写出（由$x=\sum_{i=1}^{n}x_ie_i$）

$$\sum_{S\in W}\delta_S Sf_1(x_1)f_2(x_2)\cdots f_n(x_n)=\begin{vmatrix}f_1(x_1),f_1(x_2),\cdots,f_1(x_n)\\ f_2(x_1),f_2(x_2),\cdots,f_2(x_n)\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\\ f_n(x_1),f_n(x_2),\cdots,f_n(x_n)\end{vmatrix}$$

取$f^k(x_j)=e^{ix_j\varphi^k}$用于(27.28)，并注意(27.29)和(27.30)，最后可得

$$\chi_M(\varphi)=\begin{vmatrix} e^{il_1\varphi^1}, & e^{il_2\varphi^1}, & \cdots, & e^{il_n\varphi^1} \\ e^{il_1\varphi^2}, & e^{il_2\varphi^2}, & \cdots, & e^{il_n\varphi^2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ e^{il_1\varphi^n}, & e^{il_2\varphi^n}, & \cdots, & e^{il_n\varphi^n} \end{vmatrix} \div \begin{vmatrix} e^{il_1^0\varphi^1}, & e^{il_2^0\varphi^1}, & \cdots, & e^{il_n^0\varphi^1} \\ e^{il_1^0\varphi^2}, & e^{il_2^0\varphi^2}, & \cdots, & e^{il_n^0\varphi^2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ e^{il_1^0\varphi^n}, & e^{il_2^0\varphi^n}, & \cdots, & e^{il_n^0\varphi^n} \end{vmatrix} \tag{27.31}$$

注意，φ本是$\mathscr{R}_l$中的矢量，有$l=n-1$个独立分量，但对A_l，$\mathscr{R}_l$是作为$\mathscr{R}_{l+1}$的子空间（超平面）看待的，$\mathscr{R}_l$中的矢量则作为满足条件(24.98)的$\mathscr{R}_{l+1}$中的矢量看待，所以尽管φ在$\mathscr{R}_{l+1}$中有$n=l+1$个分量

$$\varphi^1,\ \varphi^2,\ \cdots,\ \varphi^n$$

但因

$$\sum_{i=1}^{n}\varphi^i=0 \tag{27.32}$$

这n个分量中只有$n-1=l$个是独立的。这样做只是为了形式上的对称和方便，也可以不引入$\mathscr{R}_{l+1}$而直接使用$\mathscr{R}_l$中的基。(27.31)与(27.29)、(27.30)给出了$SU(n)$的首权为M的不可约表示的特征标作为群的类参数的函数之解析公式。

27.4 不可约表示的维数及权的重数

由不可约表示的特征标的外尔公式，可以导出不可约表示的维数以及权的重数的公式。

显然，以M为首权的不可约表示的维数应为

$$n(M)=\chi_M(0)=\lim_{t\to 0}\chi_M(t\varphi) \tag{27.33}$$

将(27.28)代入上式，并注意内积的性质

$$(v,t\varphi)=(tv,\varphi)=t(v,\varphi)$$

以及

$$(Sv,\varphi)=(v,S^{-1}\varphi)=(S^{-1}\varphi,v) \qquad (27.34)$$

和

$$\delta_S=\delta_{S^{-1}},\quad \sum_{S\in W}=\sum_{S^{-1}\in W}$$

其中，$S\in W$，是空间$\mathscr{R}$中的正交变换。便可得

$$n(M)=\lim_{t\to 0}\frac{\sum\limits_{S\in W}\delta_S e^{i(S\varphi,t(M+\delta))}}{\sum\limits_{S\in W}\delta_S e^{i(S\varphi,t\delta)}} \qquad (27.35)$$

利用公式

$$\sum_{S\in W}\delta_S e^{i(S\delta,v)}=\prod_{\alpha^+}[e^{\frac{i}{2}(\alpha,v)}-e^{-\frac{i}{2}(\alpha,v)}] \qquad (27.36)$$

并令(27.35)中的$\varphi=\delta$（注意(27.35)对任意$\varphi\neq 0$都成立，而$\delta>0$），便可得出(27.35)式的分子和分母对t作幂级数展开时的最低次项，它们分别为$\prod\limits_{\alpha^+}[it(\alpha,M+\delta)]$和$\prod\limits_{\alpha^+}(it(\alpha,\delta)]$。消去关于$it$的共同的幂，最后得到

$$h(M)=\frac{\prod\limits_{\alpha^+}(\alpha,M+\delta)}{\prod\limits_{\alpha^+}(\alpha,\delta)} \qquad (27.37)$$

这便是任意半单李代数（其根系已知）的以M为首权的不可约表示维数的一般公式。推演中用到的外尔公式(27.28)，当将φ解释为群的类参数时，要求群是紧致的；如将φ仅仅理解为$\mathscr{H}$的坐标（即$\mathscr{R}_l$中的矢量）时，则(27.28)对任意李代数（或其表示的特征标）都是成立的。所以，维数公式(27.37)不受紧致性限制。

例 典型群的不可约表示的维数

对于A_l，δ由(27.14)给出，从而有

$$(\alpha,\delta)=(e_i-e_j,\delta)=\frac{1}{2(l+1)}(\delta_i-\delta_j),\quad i<j$$

$$(\alpha,M+\delta)=\frac{1}{2(l+1)}[(M_i-M_j)+(\delta_i-\delta_j)],\quad i<j$$

所以(27.37)化为

$$n(M)=\prod_{(i<j)}\frac{(M_i-M_j)+(\delta_i-\delta_j)}{\delta_i-\delta_j}\tag{27.38}$$

类似地容易得出其余的典型群的相应公式：

B_l
C_l

$$n(M)=\prod_i\frac{M_i+\delta_i}{\delta_i}\prod_{(i<j)}\frac{(M_i-M_j)+(\delta_i-\delta_j)}{\delta_i-\delta_j}\cdot\frac{(M_i+M_j)+(\delta_i+\delta_j)}{\delta_i+\delta_j}\tag{27.39}$$

D_l

$$n(M)=\prod_{(i<j)}\frac{(M_i+M_j)+(\delta_i+\delta_j)}{\delta_i+\delta_j}\cdot\frac{(M_i-M_j)+(\delta_i-\delta_j)}{\delta_i-\delta_j}\tag{27.40}$$

由外尔的特征标公式还可导出关于不可约表示的权的重数的一个公式。由（27.27）可见，以M为首权的不可约表示的权m的重数γ_m是该表示的特征标$\chi_M(\varphi)$对φ的付里叶展开的系数。为了利用这一点，应设法将$\chi_M(\varphi)$向$e^{i(m,\varphi)}$展开，然后再比较系数。

由公式(27.36)有

$$\sum_{S\in W}\delta_S\cdot e^{i(S\delta,\varphi)}=\prod_{\alpha^+}e^{\frac{i}{2}(\alpha,\varphi)}[1-e^{-i(\alpha,\varphi)}]$$

$$=e^{i(\zeta,\varphi)}\cdot\prod_{\alpha^+}(1-e^{-i(\alpha,\varphi)})$$

上式的倒数为

$$e^{-i(\delta,\varphi)}\prod_{\alpha^+}[1+e^{-i(\alpha,\varphi)}+e^{-i(2\alpha,\varphi)}+\cdots+e^{-i(n\alpha,\varphi)}+\cdots]$$

$$=e^{-i(\delta,\varphi)}\cdot\sum e^{-i(n_1\alpha_1+n_2\alpha_2+\cdots+n_r\alpha_r,\varphi)}$$

其中$\{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_r\}$是$\mathscr{L}_c$的正根的集合。记

$$\mu=n_1\alpha_1+n_2\alpha_2+\cdots+n_r\alpha_r$$

它是整数个正根之和（α_i在其中出现n_i次）。显然，将μ分解为整数个正根之和的方法不是唯一的，若这个分解的方法数为$P(\mu)$，则在上面的Σ号内将有$P(\mu)$个$e^{-i(\mu,\varphi)}$项。因而可把上面的式子写为

$$e^{-i(\delta,\varphi)}\cdot\sum_{\mu}P(\mu)e^{-i(\mu,\varphi)}=\sum_{\mu}P(\mu)e^{-i(\mu+\delta,\varphi)}$$

这是(27.28)式中分母的倒数，代入(27.28)得

$$\chi_M(\varphi)=\sum_{\mu}\sum_{S\in W}\delta_S P(\mu)e^{i(S(M+\delta)-(\mu+\delta),\varphi)}$$

$$=\sum_{m}\sum_{S\in W}\delta_S\cdot P[S(M+\delta)-(m+\delta)]e^{i(m,\varphi)} \tag{27.41}$$

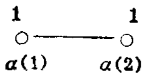
对照(27.27)，最后得到

$$\gamma_m=\sum_{S\in W}\delta_S\cdot P[S(M+\delta)-(m+\delta)] \tag{27.42}$$

这就是半单李群以M为首权的不可约表示的权m的重数公式，其中外尔群W，正根之和之半δ，函数P的形式都由群的李代数决定。这个公式也不受紧致性限制。

如果已知不可约表示的首权，则用逐步求权法(见26.3节)可以求得该表示的所有权，这些权的重数可由公式(27.42)确定。

例如，$SU(3)(A_2)$的不可约表示ρ_{11}



的首权为（见(25.70)，(25.71)，(25.72)）

$$M=M(1)+M(2)=e_1-e_3=\alpha(1)+\alpha(2)$$

其中 $\alpha(1)$和 $\alpha(2)$为 A_2 的单纯根。A_2 的另一个正根是 $\alpha(3)=e_1-e_3=\alpha(1)+\alpha(2)$ ， $\delta=(\alpha(1)+\alpha(2)+\alpha(3))/2=\alpha(1)+\alpha(2)=e_1-e_3$。用逐次求权法易求得 ρ_{11} 的所有权： 0 层的即 $M=\alpha(1)+\alpha(2)$； 1 层的有$\alpha(1)$和$\alpha(2)$ ； 2 层的只有 0 ； 3 层的有 $-\alpha(1)$和 $-\alpha(2)$； 4 层的只有 $-\alpha(1)-\alpha(2)$ 。共有 7 个权。由(27.38)可算出ρ_{11}的维数为 8 ，可见 7 个权中只有 1 个是二重的，其余 6 个都是单重的。利用公式 (27.42) 计算权 0 的重数

$$\gamma_0=\sum_{i=1}^{6}\delta_{S_i}P[S_i(2e_1-2e_3)-(e_1-e_3)]$$

其中S_i是对$\mathscr{R}_3$中的矢量的坐标（在基$\{e_i\}$下的）的置换

$$S_1=(1),\ S_2=(123),\ S_3=(213),$$
$$S_4=(12),\ S_5=(13),\ S_6=(23)$$

γ_0可写为

$$\begin{aligned}\gamma_0=&P(e_1-e_3)+P(-e_1-2e_2+3e_3)+P(-3e_1\\&+2e_2+e_3)-P(-e_1+2e_2-e_3)-P(-3e_1\\&+3e_3)-P(e_1-2e_2+e_3)\end{aligned}$$

上式中，只有第一、六两项中的矢量是正的，所以其余四项都是零（负矢量不能分解为正根之和，其 P值为零）。而

$$e_1-e_3=\alpha(1)+\alpha(2)=\alpha(3)\Rightarrow P(e_1-e_3)=2$$
$$e_1-2e_2+e_3=\alpha(1)-\alpha(2)\Rightarrow P(e_1-2e_2+e_3)=0$$

从而得

$$\gamma_0=2$$

可见，唯一的二重权是 $m=0$。

27.5 不可约表示的直积的约化

设 $A^{(M')}$和$A^{(M'')}$ 为半单李群G的两个不可约表示,它们的直积 $A^{(M')}\otimes A^{(M'')}$ 一般是G的可约表示(指标 M', M''是表示的首权）。按完全可约性，后者可以分解为若干个不可约表示

的直和

$$A^{(M')}\otimes A^{(M'')}=\sum_M a(M',M'';\ M)A^{(M)} \qquad (27.43)$$

这便是群G的C—G级数。系数a可以通过特征标乘积的分解来确定

$$\chi_{M'}(\varphi)\chi_{M''}(\varphi)=\sum_M a(M',M'';\ M)\chi_M(\varphi) \qquad (27.44)$$

利用特征标的外尔公式和权的重数公式(27.42)可以导出一个计算系数$a(M',M'';M)$的公式。在(27.44)中，$\chi_{M'}(\varphi)$用(27.27)和(27.42)代入，而$\chi_{M''}(\varphi)$和$\chi_M(\varphi)$用(27.28)代入

$$\sum_m\sum_{S\in W}\sum_{S'\in W}\delta_{SS'}P[S(M'+\delta)-(m+\delta)]\,e^{i(S'(M''+\delta)+m,\varphi)}$$

$$=\sum_M\sum_{S\in W}\delta_S a[M',M'';\ M)e^{i(S(M+\delta),\varphi)}$$

在上式的左边令$m=\nu+\delta-S'(M''+\delta)$，将对$m$的求和换为对$\nu$的求和；在右边令$S(M+\delta)=\nu+\delta$，将对$M$的求和换为对$\nu$的求和，又有

$$\sum_\nu\sum_{S\in W}\sum_{S'\in W}\delta_{SS'}P[S(M'+\delta)+S'(M''+\delta)-\nu-2\delta]e^{i(\nu+\delta,\varphi)}$$

$$=\sum_\nu\sum_{S\in W}\delta_S a(M',M'';\ S(\nu+\delta)-\delta)e^{i(\nu+\delta,\varphi)}$$

(在上式的右边已用到$\delta_S=\delta_{S^{-1}}$和$\sum_{S^{-1}\in W}=\sum_{S\in W}$) 比较上式两边的$e^{i(\nu+\delta,\varphi)}$的系数，得

$$\sum_{S\in W}\sum_{S'\in W}\delta_{SS'}P[S(M'+\delta)+S'(M''+\delta)-\nu-2\delta]$$

$$=\sum_{S\in W}\delta_S a(M',M'';\ S(\nu+\delta)-\delta)$$

现在取上式中的ν为某一不可约表示的首权M，则按25.3节的定理1之2°，$SM(S\in W)$也是该表示的一个权，且有$SM\leqslant M$。若$S(M+\delta)-\delta$是另一不可约表示的首权，按同一理由，以$S^{-1}(S^{-1}\in W)$对其作用后得到这个表示的一个权，且有

$(M+\delta)-S^{-1}\delta\leqslant S(M+\delta)-\delta=SM+S\delta-\delta$。总之有关系

$$M+(\delta-S^{-1}\delta)\leqslant SM+S\delta-\delta\leqslant M-(\delta-S\delta)$$

但因外尔群的任意元不能将所有正根都变成正根，除非是单位元$S=1$；可知

$$\delta-S^{-1}\delta\geqslant 0,\ \delta-S\delta\geqslant 0$$

且其中的等号只在$S=1$时成立。因此，由关于M的不等式（注意这里的符号$<$表示矢量的高低的次序关系），必有

$$S=1$$

这是$S(M+\delta)-\delta$成为一个不可约表示的首权的必要条件。但$a(M',M'';\ S(M+\delta)-\delta)$ 中的第三个变量为首权时它才不为零，所以和式$\sum\limits_{S\in W}\delta_S a(M',M'';\ S(M+\delta)-\delta)$中只有$S=1$的一项。于是得到

$$a(M',M'';\ M)=\sum_{S\in W}\sum_{S'\in W}\delta_{SS'}P[S(M'+\delta)+S'(M''+\delta)-M-2\delta] \tag{27.45}$$

这就是在以M'和M''为首权的两个不可约表示的直积的约化中，以M为首权的不可约表示出现的次数公式。此结果也不受紧致性限制，对任意半单李群都成立。

公式(27.45)中含有对外尔群元的双重求和，当外尔群很大时，这个求和的计算是繁重的。当表示$A^{(M')}$和$A^{(M')}$中有一个的权及其重数为已知时，可以使用另一个更为实用的公式来求C——G级数。此公式可如下导出。

$\chi_{M'}(\varphi)$和$\chi_{M''}(\varphi)$分别用(27.27)和(27.28)代入，得

$$\chi_{M'}(\varphi)\chi_{M''}(\varphi)=\sum_{S\in W}\delta_S\sum_m\gamma_m^{(M')}e^{i(S(M''+\delta)+m\cdot\varphi)}\Big/\sum_{S\in W}e^{i(S\delta,\varphi)}$$

注意外尔群的元只是置换不可约表示的权，且不改变权的重数($\gamma_{Sm}=\gamma_m$)，则

$$\sum_m \gamma_m^{(M')} e^{i(S(M''+\delta)+m\cdot\varphi)} = \sum_m \gamma_m^{(M')} e^{i(S(M''+\delta)+m\cdot\varphi)}$$

于是前式右边的分子可写为

$$\sum_m \gamma_m^{(M')} \sum_{S\in W} \delta_S e^{i(S(M''+\delta)+m\cdot\varphi)}$$

我们来研究其中对S求和的式子$\sum_{S\in W}\delta_S e^{i(S\mu,\varphi)}$的性质。设$S'$是$W$的任意固定元，注意到当$S$跑遍$W$时$SS'$也跑遍$W$，以及$\delta_{SS'}=\delta_S\cdot\delta_{S'}$，有

$$\sum_{S\in W}\delta_S e^{i(S\mu,\varphi)}=\delta_{S'}\cdot\sum_{S\in W}\delta_S e^{i(SS'\mu,\phi)}$$

如果W中存在非单位元使μ不变，则矢量μ必在W的某个生成元Σ的反映面上，从而有

$$\Sigma\mu=\mu,\quad \delta_\Sigma=-1$$

取前式中的$S'=\Sigma$便得

$$\sum_{S\in W}\delta_S e^{i(S\mu,\varphi)}=-\sum_{S\in W}\delta_S e^{i(S\mu,\varphi)}$$

于是必有

$$\sum_{S\in W}\delta_S e^{i(S\mu,\varphi)}=0$$

如果W中不存在使μ不变的非单位元，则有

$$S_1\mu=S_2\mu\Rightarrow S_1=S_2$$

因而W中使$S\mu$达到最大（最高）值的元是唯一的。设这个元为$\Sigma(\Sigma\mu\geqslant S\mu,\ S\in W)$，并取前面的$S'=\Sigma$，又得

$$\sum_{S\in W}\delta_S e^{i(S\mu,\varphi)}=\delta_\Sigma\cdot\sum_{S\in W}\delta_S e^{i(S\Sigma\mu,\varphi)}$$

总之有

$$\sum_{S\in W}\delta_S e^{i(S\mu,\varphi)}=t(\mu)\cdot\sum_{S\in W}\delta_S e^{i(S\Sigma\mu,\varphi)}$$

其中

$$t(\mu)=\begin{cases}0, & \text{当}W\text{中有}S\neq 1\text{，使}S\mu=\mu\\ \delta_\Sigma, & \text{当}W\text{中只有}S=1\text{使}\mu\text{不变}\end{cases}\qquad(27.46)$$

而$\Sigma\in W$（唯一的）满足

$$\Sigma\mu\geqslant S\mu,\quad S\in W \tag{27.47}$$

利用这些结果可得

$$\chi_{M'}(\varphi)\chi_{M'}(\varphi)=\sum_m \gamma_m^{(M')}\, t(m+M''+\delta) \cdot\frac{\sum\limits_{S\in W}\delta_S e^{i(S\{m+M''+\delta\},\varphi)}}{\sum\limits_{S\in W}\delta_S\cdot e^{i(S\delta,\varphi)}}$$

其中花括号代表$S'(m+M''+\delta)(S'\in W)$中的最高者

$$\{\mu\}=\Sigma(\mu)$$

注意到上式中的分式是以$\{m+M''+\delta\}-\delta$为首权的特征标，便有最后结果

$$\chi_{M'}(\varphi)\chi_{M'}(\varphi)=\sum_m \gamma_m^{(M')}\cdot t(m+M''+\delta) \cdot\chi_{\{m+W''+\delta\}-\delta}(\varphi), \tag{27.48}$$

或（不受紧致性限制）

$$A^{(M')}\otimes A^{(M')}=\sum_m \gamma_m^{(M')}\cdot t(m+M''+\delta) \cdot A^{(\{m+M''+\delta\}-\delta)} \tag{27.49}$$

例 $SU(3)$的表示$\rho_{11}\otimes\rho_{11}$的分解

已知$SU(3)(A_2)$有

$$\delta=e_1-e_3=(1,0,-1)$$

不可约表示ρ_{11} $\overset{1}{\circ}$——$\overset{1}{\circ}$ 的首权

$$M'=M''=e_1-e_3=(1,0,-1)$$

用(27.49)中的符号有$\rho_{11}=A^{(1,0,-1)}$，要分解的直积表示$\rho_{11}\otimes\rho_{11}=A^{(1,0,-1)}\otimes A^{(1,0,-1)}$。由前面已求得的$\rho_{11}$的权及重数，可得出下表

m	$\gamma_m^{(M')}$	$m+M'+\delta$	S	$t(m+M'+\delta)$	$\{m+M'+\delta\}$	$\{m+M'+\delta\}-\delta$
(1,0,−1)	1	(3,0,−3)	(1)	1	(3,0,−3)	(2,0,−2)
(1,−1,0)	1	(3,−1,−2)	(1)	1	(3−1,−2)	(2,−1,−1)
(0,1,−1)	1	(2,1,−3)	(1)	1	(2,1,−3)	(1,1,−2)
(0,0,0)	2	(2,0,−2)	(1)	1	(2,0,−2)	(1,0,−1)
(−1,1,0)	1	(1,1,−2)	(1) (12)	0		
(0,−1,1)	1	(2,−1,−1)	(1) (23)	0		
(−1,0,1)	1	(1,0,−1)	(1)	1	(1,0,−1)	(0,0,0)

其中S为W中使$(m+M''+\delta)$不变的元，是用对矢量坐标的置换符号写出的。代入(27.49)便可得出

$$A^{(1,0,-1)}\otimes A^{(1,0,-1)}=A^{(2,0,-2)}\oplus A^{(2,-1,-1)}$$

$$\oplus A^{(1,1,-2)}\oplus 2A^{(1,0,-1)}\oplus A^{(0,0,0)} \qquad (27.50)$$

这里的不可约表示是直接用其首权矢量在基$\{e_i\}$下的分量来标记的。在一般讨论中已经指出，首权也可以用它对于基本权（$\mathscr{R}_2$的基）的分量(k_1,k_2)来标记，相应的表示为$\rho_{k_1k_2}$。两种分量的关系由(25.58)给出

$$k_1=M_1-M_2,\quad k_2=M_2-M_3$$

所以有

$$A^{(2,0,-2)}=\rho_{22},\quad A^{(2,-1,-1)}=\rho_{30},\quad A^{(1,1,-2)}=\rho_{03},$$

$$A^{(1,0,-1)}=\rho_{11},\quad A^{(0,0,0)}=\rho_{00}$$

(27.50)也可写为

$$\rho_{11}\otimes\rho_{11}=\rho_{22}\oplus\rho_{30}\oplus\rho_{03}\oplus 2\rho_{11}\oplus\rho_{00} \qquad (27.51)$$

用表示的角图来表示就是

$$\overset{1}{\circ}\text{——}\overset{1}{\circ}\otimes\overset{1}{\circ}\text{——}\overset{1}{\circ}=\overset{2}{\circ}\text{——}\overset{2}{\circ}\oplus\overset{3}{\circ}\text{——}\overset{0}{\circ}$$

$$\oplus\overset{0}{\circ}\text{——}\overset{3}{\circ}\oplus\overset{1}{\circ}\text{——}\overset{1}{\circ}\oplus\overset{1}{\circ}\text{——}\overset{1}{\circ}\oplus\overset{0}{\circ}\text{——}\overset{0}{\circ}$$

首权为零的不可约表示是单位表示。

§ 28　例——SU(3)、SO(4)、SO(3,1)的表示

28.1　$SU(3)$的表示

$SU(3)$的李代数 $su(3)$ 是 A_2 的紧实形，它的表示论可归结为A_2的表示论，这已如前所述。在26.4节中已对 A_l 的不可约表示的构造进行了讨论，将其一般结论用于 A_2 即可引出$SU(3)$的不可约表示。前面已经提到，$SU(3)(A_2)$的两个基本表示都是初等表示，即$\rho_{10}=\rho_1\overset{1}{\circ}\text{——}\circ$和$\rho_{01}=\rho_2\circ\text{——}\overset{1}{\circ}$。$\rho_1$是自然表示，$\rho_2$是$\rho_1$的对偶表示。任意不可约表示$\rho_{k_1k_2}$可由$\rho_1$和$\rho_2$按下式产生

$$\rho_{k_1k_2}=\overline{\rho_1^{k_1}\otimes\rho_2^{k_2}} \tag{28.1}$$

也可单由ρ_1按如下的方式产生：$\rho_{k_1k_2}$为$\rho_1^{k_1+2k_2}$中首权为

$$\begin{aligned}M&=k_1M(1)+k_2M(2)\\&=\left(k_1+k_2-\frac{k_1+2k_2}{3}\right)e_1+\\&\quad\left(k_2-\frac{k_1+2k_2}{3}\right)e_2+\left(-\frac{k_1+2k_2}{3}\right)e_3\end{aligned}$$

的不可约成分。由$\rho_1^{k_1+2k_2}$求出首权为M的不可约成分$\rho_{k_1k_2}$，可以借助于置换群的表示理论来实现。设ρ_1的基为$\{\psi_i\}$，则$\rho_1^\nu=\rho^{k_1+2k_2}$的基为

$$\{\psi_{i_1}\psi_{i_2}\cdots\psi_{i_\nu}\}$$

考虑ν阶置换的群S_ν，让S_ν的每个置换对应基矢的一个变换：

新基矢由原基矢的下标经相应的置换得出。这样就在由基$\{\psi_{i_1}\psi_{i_2}\cdots\psi_{i_\nu}\}$所张成的空间$\mathscr{V}^\nu$上又定义了群$S_\nu$的一个表示$\sigma$。容易验证，$\mathscr{V}^\nu$上的两个表示$\rho_1^\nu$和$\sigma$是互易的。由 14.2 节的一般结果可知，当我们把空间$\mathscr{V}^\nu$按S_ν的不可约表约化时，相应于S_ν的不可约表示$\sigma^{(i)}$的基矢矩形的列将按$SU(3)(A_2)$的同一个表示变换。能够证明，A_2的这个表示也是不可约的，而且它与S_ν的表示$\sigma^{(i)}$相互决定。若$\sigma^{(i)}$的标记为分割

$$
\begin{aligned}
[\lambda]&=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_\nu]\\
&=[\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,0,\cdots,0]\\
&=[\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3]
\end{aligned}
\tag{28.2}
$$

$$
\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\lambda_3\geqslant 0,\quad \lambda_1+\lambda_2+\lambda_3=\nu \tag{28.3}
$$

则由$\sigma^{(i)}$导出的A_2的不可约表$\rho_{k_1k_2}$的标记(k_1,k_2)为

$$
\begin{cases}k_1=\lambda_1-\lambda_2\\ k_2=\lambda_2-\lambda_3\end{cases}\quad\text{或}\quad\begin{cases}\lambda_1=k_1+k_2\\ \lambda_2=k_2\\ \lambda_3=0\end{cases} \tag{28.4}
$$

所以，为了在空间$\mathscr{V}^\nu$中求得表示ρ_{k_1},ρ_{k_2}的一组基，只需作出按S_ν的不可约表示$[\lambda]=[k_1+k_2,k_2]$变换的基矢矩形的一个列，例如第 1 列。而这可以用20.3节中的方法来实现。从而又可得出表示$\rho_{k_1k_2}$的矩阵。

按(25.75)，互相对偶的表示其H_i算子（已取对角形）只差一符号，因而两个表示的权的集合也只差一符号。由此可知，每个表示的首权必为其对偶表示的最低权乘以(-1)。反之，如果两个表示的权有此种关系，则它们必对偶。我们已知ρ_1和ρ_2是对偶的，即$M(1)$和$-M(2)$分别为ρ_1的最高权和最低权($M(1)$和$M(2)$表示ρ_1和ρ_2的首权，由（25.70）给定）。而ρ_2的最高权的最低权分别为$M(2)$和$-M(1)$。从而，由(28.1)可知，$\rho_{k_1k_2}$的最高和最低权分别为$k_1M(1)+k_2M(2)$和$-k_1M(2)-k_2M(1)$，而$\rho_{k_2k_1}$的最高和最低权分别为$k_2M(1)$

$+k_1M(2)$和$-k_2M(2)-k_1M(1)$。因而表示$\rho_{k_1k_2}$和$\rho_{k_2k_1}$是对偶的。又由变换（24.104）可见，由$A_2\cong sl(3)$的表示通过（24.104）所形成的$su(3)$之表示的矩阵都是反厄米的，再通过指数映射生成的$SU(3)$的表示则必为幺正的。因此，当把$\rho_{k_1k_2}$看作（实为由A_2的表示$\rho_{k_1k_2}$生成的）$SU(3)$的表示时，都是幺正的。幺正表示的对偶表示即其复共轭表示。所以，作为$SU(3)$的表示$\rho_{k_1k_2}$和$\rho_{k_2k_1}$互为复共轭表示。

至此，对于$SU(3)$的不可约表示已经提到了三种标记方法，即

$$M=(M_1,M_2,M_3),\ (k_1,k_2),\ [\lambda_1,\lambda_2]$$

三者之间的关系已在上面给出，即(28.4)及

$$\begin{cases} M_1=k_1+k_2-\dfrac{1}{3}(k_1+2k_2) \\ M_2=k_2-\dfrac{1}{3}(k_1+2k_2) \\ M_3=-\dfrac{1}{3}(k_1+2k_2) \end{cases} \tag{28.5}$$

在粒子物理中，用维数来标记$SU(3)$的不可约表示。按维数公式(27.38)，对$SU(3)(A_2)$有

$$n(M)=\frac{1}{2}(M_1-M_2+1)(M_1-M_3+2)(M_2-M_3+1)$$

或

$$n(k_1k_2)=\frac{1}{2}(k_1+1)(k_2+1)(k_1+k_2+2) \tag{28.6}$$

$$n([\lambda_1,\lambda_2])=\frac{1}{2}(\lambda_1-\lambda_2+1)(\lambda_2+1)(\lambda_1+2) \tag{28.7}$$

由(28.6)可见，$n(k_1k_2)=n(k_2k_1)$，即复共轭的表示有相同的维数。所以在用维数来标记不可约表示时，还需区分同维数的

两个复共轭表示。约定：$k_1 \geqslant k_2$ 的表示 $(k_1 k_2)$ 用其维数 n 表示，其复共轭表示$(k_2 k_1)$用 $\bar{n}$ 来表示。显然，$k_1 = k_2$的表示与其复共轭表示是等价的，所以不必另外规定其复共轭表示的记号。下面列出$SU(3)$的一些低维的不可约表示：

维数记法	(k_1, k_2)	$[\lambda_1, \lambda_2]$	(M_1, M_2, M_3)
$\mathbf{1}$	$(0, 0)$	$[0, 0]$	$(0, 0, 0)$
$\mathbf{3}$	$(1, 0)$	$[1, 0]$	$\left(\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}\right)$
$\bar{\mathbf{3}}$	$(0, 1)$	$[1, 1]$	$\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, -\frac{2}{3}\right)$
$\mathbf{6}$	$(2, 0)$	$[2, 0]$	$\left(\frac{4}{3}, -\frac{2}{3}, -\frac{2}{3}\right)$
$\bar{\mathbf{6}}$	$(0, 2)$	$[2, 2]$	$\left(\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, -\frac{4}{3}\right)$
$\mathbf{8}$	$(1, 1)$	$[2, 1]$	$(1, 0, -1)$
$\mathbf{10}$	$(3, 0)$	$[3, 0]$	$(2, -1, -1)$
$\overline{\mathbf{10}}$	$(0, 3)$	$[3, 3]$	$(1, 1, -2)$
$\mathbf{27}$	$(2, 2)$	$[4, 2]$	$(2, 0, -2)$

维数低于27的不可约表示，没在上面列出的还有（2，1），（1，2），（3，1），（1，3），（4，0），（0，4），其维数分别为15，24，15。注意（2，1）与（4,0）的维数都是15,表明上面的维数记法并不是 $SU(3)$ 的不可约表示的一种普遍的标记方法。在粒子物理中，$SU(3)$的不可约表示中只有少数是重要的，所以用维数记法尚不致引起混淆。C——G级数(27.51)也可写为

$$\mathbf{8} \otimes \mathbf{8} = \mathbf{1} \oplus \mathbf{8} \oplus \mathbf{8} \oplus \mathbf{10} \oplus \overline{\mathbf{10}} \oplus \mathbf{27} \qquad (28.8)$$

$SU(3)$的单纯特征标可由$SU(n)$的相应公式令$n=3$求得。以$n=3$代入(27.29)和(27.30)得

$$l_1^0=1,\ l_2^0=0,\ l_3^0=-1$$

$$l_1=M_1+1,\ l_2=M_2,\ l_3=M_3-1$$

再代入(27.31)，将行列式展开，稍加整理后得出

$$\chi_M(\varphi)=\frac{i}{2}\cdot\sum_p\delta_p p e^{i[(M_1+1)\varphi_1+M_2\varphi_2+(M_3-1)\varphi_3]}$$

$$\cdot[\sin(\varphi^1-\varphi^2)+\sin(\varphi^2-\varphi^3)+\sin(\varphi^3-\varphi^1)]^{-1} \tag{28.9}$$

其中 p 是对 φ^1，φ^2，φ^3 的指标的置换，类参数满足

$$\varphi^1+\varphi^2+\varphi^3=0 \tag{28.10}$$

为了正确地得出 $SU(3)$ 的卡塞米尔算子(27.10)，需先取一组满足规范条件(24.33)的标准基。在 (24.88) 后面诸式中 $n=3$，即可得 $sl(3)$ 的一组基。令

$$X_{11}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&0\end{pmatrix},\quad X_{22}=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix},\quad X_{33}=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

$$X_{12}=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&0\\0&0&0\end{pmatrix},\quad X_{13}=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&0\\0&0&0\end{pmatrix},\quad X_{23}=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&0&0\end{pmatrix}$$

$$X_{21}=\begin{pmatrix}0&0&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix},\quad X_{31}=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&0\\1&0&0\end{pmatrix},\quad X_{32}=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}$$

以上 9 个矩阵中，后 6 个都是 $sl(3)$ 的独立元，而前 3 个不是 $sl(3)$ 的元($\mathrm{tr}\neq 0$)，但

$$H_1'=X_{11}-\frac{1}{3}\sum X_{ii},\quad H_2'=X_{22}-\frac{1}{3}\sum X_{ii},$$

$$H_3'=X_{33}-\frac{1}{3}\sum X_{ii}$$

是$sl(3)$的元($\mathrm{tr}=0$)，且满足(24.12)

$$H_1'+H_2'+H_3'=0 \tag{28.11}$$

3个H_i'张成$Sl(3)$的嘉当子代数，而

$$H_1=H_1'-H_2',\quad H_2=H_2'-H_3' \tag{28.12}$$

是嘉当子代数的一组基。$sl(3)$的标准基可取为H_1，H_2和6个$E_\alpha=\mu X_{kl}$，μ是待定的规范化常数。6个非零根为$\alpha(kl)=e(k)-e(l)$，$\{e(k)\}$是$\mathscr{R}_3$的正交基

$$(e(k),\ e(l))=\frac{1}{6}\delta_{kl} \tag{28.13}$$

α_i是H_i'的根分量($\alpha_i'=e_i(k)-e_i(l)=\delta_{ik}-\delta_{il}$)

$$[H_i',E_\alpha]=\alpha_i'E_\alpha,\quad i=1,2,3 \tag{28.14}$$

显然有

$$\alpha_1'+\alpha_2'+\alpha_3'=0 \tag{28.15}$$

所以根α是$\mathscr{R}_3$的子空间$\mathscr{R}_2$内的矢量。由(28.12)和(28.14)又有

$$\begin{cases}[H_1,E_\alpha]=(\alpha_1'-\alpha_2')E_\alpha=\alpha_1E_\alpha\\ [H_2,E_\alpha]=(\alpha_2'-\alpha_3')E_\alpha=\alpha_2E_\alpha\end{cases} \tag{28.16}$$

上式是对易关系的标准形状（α_i是根α在$\mathscr{R}_2$内的分量；α_i'是α在$\mathscr{R}_3$内的分量）。现需求出与$\{H_1,H_2\}$相应的度规张量g^{ij}。由(24.30)，并把(28.16)中的$\alpha_i=\alpha_i'-\alpha_{i+1}'$代入，有

$$g_{ij}=\sum_\alpha\alpha_i\alpha_j=\sum_{kl}(\delta_{ik}-\delta_{il}-\delta_{i+1,k}+\delta_{i+1,l})(\delta_{jk}-\delta_{jl}-\delta_{j+1,k}+\delta_{j+1,l})$$

将上式展开并去掉显然为零的项，求和后得

$$g_{ij}=6(\delta_{ij}-\delta_{i,j+1}-\delta_{i+1,j}+\delta_{i+1,j+1})$$

或

$$(g_{ij})=6\begin{pmatrix}2&-1\\-1&2\end{pmatrix} \tag{28.17}$$

从而

$$(g^{ij})=\frac{1}{18}\begin{pmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{pmatrix} \tag{28.18}$$

由此又可定出E_α中的待定常数μ

$$\begin{aligned}[E_\alpha,E_{-\alpha}]&=\mu^2[X_{kl},X_{lk}]=\mu^2(X_{kk}-X_{ll})\\&=\mu^2(H'_k-H'_l)\end{aligned}$$

另一方面，按(24.37)

$$\begin{aligned}[E_\alpha,E_{-\alpha}]&=\alpha^iH_i=g^{ij}\alpha_iH_j\\&=\frac{1}{18}[2(\delta_{1k}-\delta_{1l}-\delta_{2k}+\delta_{2l})H_1+(\delta_{1k}-\delta_{1l}-\delta_{2k}+\delta_{2l})H_2\\&+(\delta_{2k}-\delta_{2l}-\delta_{3k}+\delta_{3l})H_1+2(\delta_{2k}-\delta_{2l}-\delta_{3k}+\delta_{3l})H_2]\\&=\frac{1}{6}[(\delta_{1k}-\delta_{1l})H'_1+(\delta_{2k}-\delta_{2l})H'_2+(\delta_{3k}-\delta_{3l})H'_3]\\&=\frac{1}{6}[(\delta_{1k}+\delta_{2k}+\delta_{3k})H'_k-(\delta_{1l}\delta_{2l}+\delta_{3l})H'_l]\\&=\frac{1}{6}(H'_k-H'_l)\end{aligned}$$

所以必有

$$\mu=\frac{1}{\sqrt{6}}$$

即有

$$E_\alpha=\frac{1}{\sqrt{6}}X_{kl} \tag{28.19}$$

最后写出$SU(3)(A_2)$的卡塞米尔算子

$$\begin{aligned}\hat{C}&=\frac{1}{9}(\hat{H}_1^2+\hat{H}_1\hat{H}_2+\hat{H}_2^2)+\sum_\alpha\hat{E}_\alpha\hat{E}_{-\alpha}\\&=\frac{1}{6}(\hat{H}_1'^2+\hat{H}_2'^2+\hat{H}_3'^2+\sum_{\substack{kl\\(k\neq l)}}\hat{X}_{kl}\hat{X}_{lk})\end{aligned} \tag{28.20}$$

(注意：$(\hat{H}_1' + \hat{H}_2' + \hat{H}_3' = 0) \Rightarrow -2(\hat{H}_1'\hat{H}_2' + \hat{H}_2'\hat{H}_3' + \hat{H}_3'\hat{H}_1') = \hat{H}_1'^2 + \hat{H}_2'^2 + \hat{H}_3'^2$)。由(27.18)，算子$\hat{C}$的本征值可写为

$$\lambda = \frac{1}{6}[M_1(M_1+2) + M_2^2 + M_3(M_3-2)]$$

$$= \frac{1}{9}(k_1^2 + k_2^2 + k_1 k_2) + \frac{1}{3}(k_1 + k_2) \tag{28.21}$$

28.2 SO(4)的表示

$SO(4)$是实四维空间中的旋转群，它的一种同构形式是4阶实正交单模方阵群。$SO(4)$的李代数是$so(4)$，可取为4阶实反对称方阵李代数，其复扩充$so(4,C)$为4阶复反对称方阵李代数。而$so(4,C)\cong D_2 \cong B_1 \oplus B_1 \cong so(3,C)\oplus so(3,C)$。取其紧实形，有群的同构关系

$$SO(4) \cong SO(3) \times SO(3) \tag{28.22}$$

所以$SO(4)$的不可约表示可由两个$SO(3)$的不可约表示的直积构成。可见，主要的问题在于给出(28.22)的群元间具体的同构对应。为此，我们对4阶实反对称方阵的李代数$so(4)$进行更具体的讨论。

$$so(4) = \{A: \tilde{A} = -A\} \tag{28.23}$$

其一般元可写为(a_i和b_i为实数)

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -a_3 & a_2 & -b_1 \\ a_3 & 0 & -a_1 & -b_2 \\ -a_2 & a_1 & 0 & -b_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 & 0 \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{3}(a_i I_i + b_i K_i) \tag{28.24}$$

其中

$$
\left\{
\begin{aligned}
&I_1=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&-1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&0\end{pmatrix},\quad I_2=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&0&0\end{pmatrix},\\
&I_3=\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&0\end{pmatrix},K_1=\begin{pmatrix}0&0&0&-1\\0&0&0&0\\0&0&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix},\\
&K_2=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&-1\\0&0&0&0\\0&1&0&0\end{pmatrix},K_3=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&-1\\0&0&1&0\end{pmatrix}
\end{aligned}
\right.
\tag{28.25}
$$

是$so(4)$的一组基。易验证，它们的对易式为

$$[I_i,I_j]=\sum_k\varepsilon_{ijk}I_k \tag{28.26}$$

$$[K_i,I_j]=\sum_k\varepsilon_{ijk}K_k \tag{28.27}$$

$$[K_i,K_j]=\sum_k\varepsilon_{ijk}I_k \tag{28.28}$$

以上三式决定了李代数$so(4)$的结构常数。(28.26)和(4 14)表明，$so(3)$是（同构于）$so(4)$的一个子代数（由I_1，I_2，I_3张成）。

在$so(4)$中引入新的基

$$
\left\{
\begin{aligned}
M_i&=\frac{1}{2}(I_i+K_i)\\
N_i&=\frac{1}{2}(I_i-K_i)
\end{aligned}
\right.
\qquad i=1,2,3 \tag{28.29}
$$

易得出其对易式

$$\begin{cases}[M_i,M_j]=\sum_k\varepsilon_{ijk}M_k\\ [N_i,N_j]=\sum_k\varepsilon_{ijk}N_k\\ [M_i,N_j]=0\end{cases}\tag{28.30}$$

可见，$so(4)$ 等于分别由$\{M_1,M_2,M_3\}$和$\{N_1,N_2,N_3\}$张成的两个子代数的直和，而这两个子代数都同构于$so(3)$。并且，$so(4)$的一般元(28.24)可写为

$$A=\sum_{i=1}^{3}(\alpha_iM_i+\beta_iN_i)=\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{M}+\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{N}\tag{28.31}$$

其中

$$\begin{cases}\alpha_i=a_i+b_i\\ \beta_i=a_i-b_i\end{cases}\quad i=1,2,3\tag{28.32}$$

都是实参数。所以群$SO(4)$的元可写为

$$e^A=e^{\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{M}+\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{N}}=e^{\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{M}}\cdot e^{\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{N}}\tag{28.33}$$

而$e^{\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{M}}$和$e^{\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{N}}$分别对应（同构）于$SO(3)$群的以$\boldsymbol{\alpha}$和$\boldsymbol{\beta}$为转动矢量的元。这样就得到了(28.22)的群元间的同构对应。在§21中已求出$SO(3)$的不可约表示矩阵$D^{(j)}(\boldsymbol{\alpha})$，现由（28.30）和(28.33)便可立即写出$SO(4)$的不可约表示矩阵

$$\begin{cases}D^{(j_1,j_2)}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=D^{(j_1)}(\boldsymbol{\alpha})\otimes D^{(j_2)}(\boldsymbol{\beta})\\ j_1,j_2=0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},\cdots\end{cases}\tag{28.34}$$

在上式中，$SO(4)$的 6 个实参数已取为$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$，与$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$对应的群元由(28.33)确定。当将群参数取为$(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$时，可得

$$\begin{cases}D^{(j_1,j_2)}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})=D^{(j_1)}(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})\otimes D^{(j_2)}(\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b})\\ j_1,j_2=0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},\cdots\end{cases}\tag{28.35}$$

其中与$(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$对应的群元$e^A$应由(28.24)确定。总之，$SO(4)$的不可约表示是由两个量子数$(j_1,j_2)$来标记的，并由(28.34)或(28.35)表示，而$D^{(j)}$是已知矩阵。

显然，$D^{(j_1,j_2)}$的维数为$D^{(j_1)}$与$D^{(j_2)}$的维数之积

$$n(j_1,j_2)=(2j_1+1)(2j_2+1) \tag{28.36}$$

而$D^{(j_1,j_2)}$的特征标为$D^{(j_1)}$与$D^{(j_2)}$的特征标之积

$$\begin{aligned}\chi^{(j_1,j_2)}(\alpha,\beta)&=\chi^{(j_1)}(\alpha)\chi^{(j_2)}(\beta)\\&=\sin\left(j_1+\frac{1}{2}\right)\alpha\cdot\sin\left(j_2+\frac{1}{2}\right)\beta\quad\left(\sin\frac{\alpha}{2}\sin\frac{\beta}{2}\right)\end{aligned} \tag{28.37}$$

其中

$$\begin{cases}\alpha=|\boldsymbol{\alpha}|=[\alpha_1^2+\alpha_2^2+\alpha_3^2]^{1/2}\\ \beta=|\boldsymbol{\beta}|=[\beta_1^2+\beta_2^2+\beta_3^2]^{1/2}\end{cases} \tag{28.38}$$

由$SO(3)$的C—G级数（见§21）

$$D^{(j)}\otimes D^{(j')}=\sum_{J=|j-j'|}^{j+j'}D^{(J)}$$

和(28.34)可得出$SO(4)$的C—G级数

$$D^{(j_1,j_2)}\otimes D^{(j_1',j_2')}=\sum_{J_1=|j_1-j_1'|}^{j_1+j_1'}\ \sum_{J_2=|j_2-j_2'|}^{j_2+j_2'}D^{(J_1,J_2)} \tag{28.39}$$

在§22中已求得$SO(3)$的C—G系数(见(22.27)式) $S^{jj'}_{mm',JM}=(jmj'm'|JM)$，即直积$D^{(j)}\otimes D^{(j')}$被相似变换矩阵$S^{jj'}=(S^{jj'}_{mm',JM})$所约化。由(28.39)可见，直积$D^{(j_1,j_2)}\otimes D^{(j_1',j_2')}$将被相似变换矩阵

$$S^{j_1j_1'}\otimes S^{j_2j_2'}=\left(S^{j_1j_1'}_{m_1m_1';J_1M_1}S^{j_2j_2'}_{m_2m_2';J_2M_2}\right) \tag{28.40}$$

所约化。所以，$SO(4)$的C—G系数等于$SO(3)$的C—G系数的二重积，由(28.40)确定。

以上结果表明，$SO(4)$的表示论可归结为已知的$SO(3)$的表示论。注意到李代数$so(4)$是$so(4,C)\cong D_2$的紧实形，这些

结果也能从关于 D_2 的表示的一般结论得出。这时要将对易关系(28.30)标准化（即将M_i、N_i 换为 $so(4,C)$ 的标准基）。在25.1节中已经指出，对$so(3,C)\cong sl(2)$来说，规范化的准基为$\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}J_3,\ \frac{1}{2}J_+,\ \frac{1}{2}J_-\right\}$。再将$J_i$的对易子积与（28.30）对照，就不难看出，$so(4,C)$的标准基应为

$$
\begin{cases}
H_1=\dfrac{i}{\sqrt{2}}M_3, E_\alpha=\dfrac{i}{2}(M_1+iM_2),\quad E_{-\alpha}=\dfrac{i}{2}(M_1-iM_2) \\
H_2=\dfrac{i}{\sqrt{2}}N_3, E_\beta=\dfrac{i}{2}(N_1+iN_2),\quad E_{-\beta}=\dfrac{i}{2}(N_1-iN_2)
\end{cases}
\tag{28.41}
$$

对照(25.2)式可知，$so(4,C)\cong D_2$的四个非零根为

$$
\pm\alpha=\pm\left(\frac{1}{\sqrt{2}},\ 0\right)\quad \pm\beta=\pm\left(0,\ \frac{1}{\sqrt{2}}\right)
$$

其中两个正根α和β组成 D_2 的单纯根系（注意：此处的α和β是李代数的根的记号）。由 25.4 节的定理 3，$M=M_1\alpha+M_2\beta$是D_2的某不可约表示之首权的充要条件为（注意$(\alpha,\beta)=0$）

$$
\begin{cases}
2M_1=k_1=0,1,2,\cdots \\
2M_2=k_2=0,1,2,\cdots
\end{cases}
$$

可见有

$$
(M_1,M_2)=(j_1,j_2)
$$

所以D_2的不可约表示可用首权对单纯根系的分量(j_1,j_2)来标记。将$M=j_1\alpha+j_2\beta$直接代入维数公式(27.37)，并注意$g_{ij}=\delta_{ij}$，$\delta=\frac{1}{1}(\alpha+\beta)$，便得

$$
n(j_1,j_2)=\frac{\left(j_1+\frac{1}{2}\right)\Big/2}{1/4}\cdot\frac{\left(j_2+\frac{1}{2}\right)\Big/2}{1/4}=(2j_1+1)(2j_2+1)
$$

此即(28.36)。

由(25.2)不难看出，算子

$$\hat{F}_1=\hat{H}_1^2+\hat{E}_\alpha\hat{E}_{-\alpha}+\hat{E}_{-\alpha}\hat{E}_\alpha=-\frac{1}{2}\hat{M}^2 \qquad (28.42)$$

与$\hat{H}_1$、$\hat{E}_\alpha$、$\hat{E}_{-\alpha}$对易，因而与$(\hat{H}_1,\hat{H}_2,\hat{E}_\alpha,\hat{E}_\beta,\hat{E}_\alpha,\hat{E}_{-\beta})$对易；同样地，算子

$$\hat{F}_2=\hat{H}_2^2+\hat{E}_\beta\hat{E}_{-\beta}+\hat{E}_{-\beta}\hat{E}_\beta=-\frac{1}{2}\hat{N}^2 \qquad (28.43)$$

也有同样性质，而且这两个算子互易。它们的本征值分别为

$$\lambda_1=\frac{1}{2}j_1(j_1+1) \qquad (28.44)$$

$$\lambda_2=\frac{1}{2}j_2(j_2+1) \qquad (28.45)$$

因而可见，不可约表示(j_1,j_2)的表示空间，是算子组$\{\hat{F}_1,\hat{F}_2\}$的属于上述本征值的共同本征子空间。这是在27.1节末所指出的拉卡的一般结果的特例。卡塞米尔算子(27.10)为

$$\hat{C}=\hat{H}_1^2+\hat{H}_2^2+\hat{E}_\alpha\hat{E}_{-\alpha}+\hat{E}_{-\alpha}\hat{E}_\alpha+\hat{E}_\beta\hat{E}_{-\beta}+\hat{E}_{-\beta}\hat{E}_\beta=\hat{F}_1+\hat{F}_2 \qquad (28.46)$$

其本征值(27.11)为

$$\lambda=\frac{1}{2}(j_1^2+j_2^2+j_1+j_2)=\lambda_1+\lambda_2 \qquad (28.47)$$

两个独立算子可取为$\hat{F}_1$、$\hat{F}_2$或$\hat{C}$、$\hat{C}'=\hat{F}_1-\hat{F}_2$。它们的本征值和相应的本征子空间决定着不可约表示的首权和表示空间。

28.3 $SO(3,1)$的局部表示（L_p的表示）

$SO(3,1)$是使二次型

$$x_1^2+x_2^2+x_3^2-x_4^2 \qquad (28.48)$$

不变的实幺模线性变换群，写成实矩阵形式便是

$$SO(3,1)=\{A: A^{-1}=J\tilde{A}J,\ \det A=1\} \quad (28.49)$$

其中

$$J=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad ((6.29))$$

条件$A^{-1}=J\tilde{A}J$(或$\tilde{A}JA=J$)等价于(28.48),由此可证(见(6.36)式)$A_{44}^2\geqslant 1$。因此,$SO(3,1)$中的矩阵可分为$A_{44}\geqslant 1$和$A_{44}\leqslant -1$的两种情况。第一种情况包含单位矩阵I,因而形成$SO(3,1)$的一个子群,对比(6.32)式可见,这个子群是正常洛仑兹群L_p;第二种矩阵形成的子集可写为$(-I)L_p$。从而有

$$SO(3,1)=L_p\cup(-I)L_p \quad (28.50)$$

注意L_p中的矩阵($A_{44}\geqslant 1$)不可能连续地变为$(-I)L_p$中的矩阵($A_{44}\leqslant -1$),可见$SO(3,1)$是不连通的,它由两个连通分支L_p和$(-I)L_p$组成,因而由无穷小生成元只能生成$SO(3,1)$的子群L_p。所以,$SO(3,1)$的李代数$so(3,1)$也就是正常洛仑兹群L_p的李代数,$so(3,1)$通过指数映射生成L_p,而L_p的表示可由$so(3,1)$的表示通过指数映射来获得。至于群$SO(3,1)$的表示,则因它可写为子群L_p和$\{I,-I\}$的直积(由(28.42)式)

$$SO(3,1)=L_p\times\{I,-I\} \quad (28.51)$$

因而易由L_p的表示引出。所以,下面我们只讨论群L_p的表示(亦即$SO(3,1)$的局部表示)。

由(28.49)可知,$so(3,1)$由所有满足条件$J\tilde{A}J=-A$的实矩阵组成(注意此条件包含了$\mathrm{tr}A=0$)

$$so(3,1)=\{A: J\tilde{A}J=-A\} \quad (28.52)$$

将(28.52)中的A写成(|二|表3×3的子块)

$$A=\begin{pmatrix} & \Box & & A_{14} \\ & & & A_{24} \\ & & & A_{34} \\ A_{41} & A_{42} & A_{43} & A_{44} \end{pmatrix}$$

由(28.52)和(6.29)可得

$$J\tilde{A}J=\begin{pmatrix} & \widetilde{\Box} & & -A_{41} \\ & & & -A_{42} \\ & & & -A_{43} \\ -A_{14} & -A_{24} & -A_{34} & A_{44} \end{pmatrix}=-A$$

$$=\begin{pmatrix} & -\Box & & -A_{14} \\ & & & -A_{24} \\ & & & -A_{34} \\ -A_{41} & -A_{42} & -A_{43} & -A_{44} \end{pmatrix}$$

从而有

$$\begin{cases} \widetilde{\Box}=-\Box \\ A_{i4}=A_{4i}, \quad i=1,2,3 \\ A_{44}=0 \end{cases}$$

于是，$so(3,1)$中矩阵的一般形状为

$$A=\begin{pmatrix} 0 & -a_3 & a_2 & b_1 \\ a_3 & 0 & -a_1 & b_2 \\ -a_2 & a_1 & 0 & b_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 & 0 \end{pmatrix} \tag{28.53}$$

其中a_1、a_2、a_3、b_1、b_2、b_3是六个实参数。由上式即可得$so(3,1)$的一组基（在六个独立参数中取一个为1，其余为0）

$$
I_1=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&-1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&0\end{pmatrix},\ I_2=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&0&0\end{pmatrix},
$$

$$
I_3=\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&0\end{pmatrix},K_1=\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&0\end{pmatrix},
$$

$$
K_2=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&0&0\\0&1&0&0\end{pmatrix},\ K_3=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix}
\tag{28.54}
$$

它们的对易关系为

$$
\begin{cases}[I_i,I_j]=\sum\limits_k\varepsilon_{ijk}I_k\\ [K_i,I_j]=\sum\limits_k\varepsilon_{ijk}K_k\\ [K_i,K_j]=-\sum\limits_k\varepsilon_{ijk}I_k\end{cases}
\tag{28.55}
$$

对比(28.54)和9.4节中的(4.8)可见，旋转群$SO(3)$的三个生成元正是L_p的前三个生成元（只差全为零的第四行和第四列），而前者的对易式（4.14）与(28.55)中的第一对易式相同。这表明，(28.54)中的前三个基生成L_p的子群（同构于）$SO(3)$。事实上有

$$
e^{I_1a_1+I_2a_2+I_3a_3}=\begin{pmatrix} & & & 0\\ & R & & 0\\ & & & 0\\0&0&0&1\end{pmatrix},\quad R\in SO(3)
\tag{28.56}
$$

同样经简单的运算可得

$$e^{K_3b_3}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \mathrm{ch}b_3 & \mathrm{sh}b_3\\ 0 & 0 & \mathrm{sh}b_3 & \mathrm{ch}b_3\end{pmatrix} \tag{28.57}$$

对照(6.12)—(6.15)，上式表明单由生成元 K_3 生成的一维子群是特殊洛仑兹群。

为了得到L_p的（局部）表示，考虑李代数$so(3,1)$的结构。$so(3,1)$的元(28.53)可写为基(28.54)的实系数组合

$$A=\sum_{i=1}^{3}(a_iI_i+b_iK_i) \tag{28.58}$$

如将上式中的系数改为任意复数，便得到复扩充 $so(3,1,C)$的一般元A_C，且可看出$\{I_i,K_i\}$也是 $so(3,1,C)$的基。令（下式中的 i 是$\sqrt{-1}$）

$$K_l'=iK_l \tag{28.59}$$

可得出$so(3,1,C)$的另一组基$\{I_i,K_i'\}$，由(28.55)得

$$\begin{cases}[I_i,I_j]=\sum_k\varepsilon_{ijk}I_k\\ [K_i',I_j]=\sum_k\varepsilon_{ijk}K_k'\\ [K_i',K_j']=\sum_k\varepsilon_{ijk}I_k\end{cases} \tag{28.60}$$

令

$$\begin{cases}M_l=\dfrac{1}{2}(I_l+K_l')=\dfrac{1}{2}(I_l+iK_l)\\ N_l=\dfrac{1}{2}(I_l-K_l')=\dfrac{1}{2}(I_l-iK_l)\end{cases} \tag{28.61}$$

显然（与上小节对照）其对易式也是(28.30）。用这组基可将$so(3,1,C)$的一般元写为

$$
\begin{aligned}
A_C &= \sum_{l=1}^{3}[(a_l - ib_l)M_l + (a_l + ib_l)N_l] \\
&= (\boldsymbol{a} - i\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{M} + (\boldsymbol{a} + i\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{N} \\
&= \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{M} + \boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{N}
\end{aligned}
\tag{28.62}
$$

其中

$$
\begin{cases}
\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{a} - i\boldsymbol{b} \\
\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{a} + i\boldsymbol{b}
\end{cases}
\tag{28.63}
$$

a_l和b_l均为复数，故α_l和β_l也是彼此独立的复参数。当a_l、b_l取为实数时，(28.62)则给出实代数$so(3,1)$的元(28.58)，这时α_l仍为任意复数，但β_l不再是独立于α_l的参数，而有$\beta_l = \alpha_l^*$。所以，也可将$so(3,1)$的一般元写为

$$
\begin{aligned}
A &= \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{M} + \boldsymbol{\alpha}^*\cdot\boldsymbol{N} \\
&= A_C\,|_{\alpha=\beta^*}
\end{aligned}
\tag{28.64}
$$

于是L_p的一般元为

$$
e^A = e^{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{I} + \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{K}} = e^{\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{M}}\cdot e^{\boldsymbol{\alpha}^*\cdot\boldsymbol{N}} = e^{A_C}\,|_{\beta=\alpha^*}
\tag{28.65}
$$

从而，群$L_p = \{e^A\}$的表示可由群$SO(3,1,C) = \{e^{A_C}\}$的表示通过(28.65)得到。

由$\boldsymbol{M}$、$\boldsymbol{N}$互易可知，$so(3,1,C) = \{A_C\}$可分解为分别由$\{M_1, M_2, M_3\}$和$\{N_1, N_2, N_3\}$张成的两个子代数的直和。又由25.1节中的讨论和(28.30)得知，这两个子代数都同构于$sl(2)$，且有下列同构对应关系

$$
\begin{aligned}
&M_1, N_1 \sim \frac{1}{2i}(E'_a + E'_{-a}) = \frac{1}{i}(E_a + E_{-a}) = \frac{\sigma_1}{2i} \\
&M_2, N_2 \sim \frac{-1}{2}(E'_a - E'_{-a}) = -(E_a - E_{-a}) = \frac{\sigma_2}{2i} \\
&M_3, N_3 \sim \frac{1}{i}H'_1 = \frac{1}{i}\sqrt{2}H_1 = \frac{\sigma_3}{2i}
\end{aligned}
\tag{28.66}
$$

(见(25.1)、(25.2)、(25.3)、(25.4)式) 其中 σ_i 是泡利矩阵。上式可缩写为

$$\boldsymbol{M},\boldsymbol{N}\sim -i\boldsymbol{\sigma}/2 \tag{28.66}$$

或写出一般元之间的同构对应

$$\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{M},\ \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{N}\sim -i\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\sigma}/2 \tag{28.67}$$

上式写成群元间的同构关系为

$$e^{\alpha\cdot M},\ e^{\alpha\cdot N}\sim e^{-i\alpha\cdot\sigma/2} \tag{28.68}$$

利用上述结果可得

$$\begin{aligned} SO(3,1,C)&=\{e^{\alpha\cdot M}\}\times\{e^{\beta\cdot N}\}\cong SL(2)\times SL(2)\\ &\cong SO(4,C) \end{aligned} \tag{28.69}$$

(注意 $SL(2)=\{e^{-i\alpha\cdot\sigma/2}\}$, $so(4,C)\cong D_2\cong A_1\oplus A_1\cong sl(2)+sl(2)$)。由此可知，$SO(3,1,C)$的不可约表示可由$SL(2)$的不可约表示的直积给出。这已在25.1节中由(25.7)和(25.8)确定：$D^{(j)}(\boldsymbol{\alpha})$。矩阵$D^{(j)}$在形式上与$SU(2)$的表示矩阵相同，但对$SL(2)$ $\boldsymbol{\alpha}$ 是复参数，对 $SU(2)$ $\boldsymbol{\alpha}$ 是实参数。从而，由(28.65)便可得出L_p的不可约表示

$$\begin{cases} D^{(j_1,j_2)}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})=D^{(j_1)}(\boldsymbol{\alpha})\otimes D^{(j_2)}(\boldsymbol{\alpha}^*)\\ j_1,j_2=0,\dfrac{1}{2},1,\dfrac{3}{2},\cdots \end{cases} \tag{28.70}$$

可以证明，矩阵$D^{(j)}$有性质

$$D^{(j)}(\boldsymbol{\alpha})^*=SD^{(j)}(\boldsymbol{\alpha}^*)S^{-1} \tag{28.71}$$

由(7.7)知，$SL(2)$的特殊元$e^{-i\pi\sigma_2/2}=-i\sigma_2$，于是有

$$\begin{aligned} (e^{-i\alpha\cdot\sigma/2})^*&=e^{i\alpha^*\cdot\alpha^*/2}=e^{-i\alpha^*\cdot\sigma_2\sigma\sigma_2/2}\\ &=e^{(-i\sigma_2)(-i\alpha^*\cdot\sigma/2)(i\sigma_2)}=(-i\sigma_2)e^{-i\alpha^*\cdot\sigma/2}(i\sigma_2)\\ &=e^{-i\pi\sigma_2/2}e^{-i\alpha^*\cdot\sigma/2}e^{i\pi\sigma_2/2} \end{aligned}$$

注意$\sigma_2^{-1}=\sigma_2\Rightarrow(i\sigma_2)=(-i\sigma_2)^{-1}$。从而又有

$$D^{(j)}(e^{-i\alpha\cdot\sigma/2})^* = D^{(j)}((e^{-i\alpha\cdot\sigma/2})^*)$$
$$= D^{(j)}(e^{-i\pi\sigma_2/2}e^{-i\alpha^*\cdot\sigma/2}e^{i\pi\sigma_2/2})$$
$$= D^{(j)}(e^{-i\pi\sigma_2/2})D^{(j)}(e^{-i\alpha^*\cdot\sigma/2})D^{(j)}(e^{i\pi\sigma_2/2})$$

取$S=D^{(j)}(e^{-i\pi\sigma_2/2})$即得（28.71）。上式中的第一个等号的根据是，$D^{(j)}(A)$的阵元作为$A$（$A\in SL(2)$）的阵元的函数是一齐次多项式，多项式的系数都是实数并由（21.39）给出（参照(21.35)，用$SL(2)$的矩阵代替$SU(2)$的矩阵，只需将(21.39)中的β^*和$(-\gamma)^*$代以例如α和δ）。

式(28.71)表明，$D^{(j)}(\boldsymbol{\alpha}^*)$与$D^{(j)}(\boldsymbol{\alpha})^*$只差一相似变换。因而经一相似变换也能将（28.70）写为（作为L_p的表示与(28.70)是等价的）

$$\begin{cases} D^{(j_1,j_2)}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) = D^{(j_1)}(\boldsymbol{\alpha})\otimes D^{(j_2)}(\boldsymbol{\alpha})^* \\ j_1,\ j_2 = 0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ \cdots \end{cases} \tag{28.72}$$

这里需要暂时离开所讨论的问题对$D^{(j)}(\boldsymbol{\alpha})^*$作一点解释。在李群的表示论中，所说的表示都指解析表示，即表示的矩阵（阵元）为李群参数的解析函数。$SL(2)$是复三维李群，前面取$\boldsymbol{\alpha}$为三个复参数，显然$D^{(j)}(\boldsymbol{\alpha})=D^{(j)}(e^{-i\alpha\cdot\sigma/2})$是$\boldsymbol{\alpha}$的解析函数，因而都是解析表示。但因$\boldsymbol{\alpha}^*$不是$\boldsymbol{\alpha}$的解析函数，$D^{(j)}(\boldsymbol{\alpha})^*\sim D^{(j)}(\boldsymbol{\alpha}^*)$也不是$\boldsymbol{\alpha}$的解析函数，故$D^{(j)}(\boldsymbol{\alpha})^*$不是$SL(2)$的解析表示。但是，当把$D^{(j)}(\boldsymbol{\alpha})=D^{(j)}(\boldsymbol{a}-i\boldsymbol{b})$看作六个实参数$\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$的函数时，由$e^{-i(a-ib)\cdot\sigma/2}$和$e^{-i(a+ib)\cdot\sigma/2}$都是$(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$的解析函数可以看出，$D^{(j)}(\boldsymbol{\alpha})$和$D^{(j)}(\boldsymbol{\alpha})^*\sim D^{(j)}(\boldsymbol{\alpha}^*)$都是$(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$的解析函数。因而，$D^{(j_1,j_2)}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$是$L_p$的解析表示（但不是$SL(2)$的（解析）表示）。(28.27)给出了$L_p$的不可约（解析）表示的完整表，它们是以数组（$j_1$，$j_2$）为标记的。下面写出

$(j_1, j_2)=(0,0)$，$\left(\frac{1}{2},\ 0\right)$，$\left(0,\ \frac{1}{2}\right)$，$\left(\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right)$的表示矩阵。

$$D^{(0,0)}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})=1 \tag{28.73}$$

$$C^{\left(\frac{1}{2},0\right)}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})=D^{\left(\frac{1}{2}\right)}(\boldsymbol{\alpha})=e^{-i\alpha\cdot\sigma/2} \tag{28.74}$$

$$D^{\left(0,\frac{1}{2}\right)}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})=D^{\left(\frac{1}{2}\right)}(\boldsymbol{\alpha})^*=(e^{-i\alpha\cdot\sigma/2})^* \tag{28.75}$$

$$D^{\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})=e^{-i\alpha.\sigma/2}\otimes(e^{-i\alpha\cdot\sigma/2})^* \tag{28.76}$$

这四个表示的维数分别为1， 2， 2， 4。

由(28.72)可见，$D^{(j_1,j_2)}$是$(2j_1+1)\times(2j_2+1)$维的；而$D^{(j_1,j_2)}$与$D^{(j_2,j_1)}$互为复共轭表示，且有相同的维数。通过与上小节相同的考虑可知，L_p的C—G级数也是（28.39）。注意到$SL(2)$与$SU(2)$的C—G系数相同并且已取为实数，便可得知L_p的C—G系数也是$SU(2)$的C—G系数的二重乘积(见28.40)。

在25.1节已经讲到，复三维李群$SL(2)$也可看作是一个实六维李群，后者记作“实$SL(2)$”。上面的复$\boldsymbol{\alpha}$和实$(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$便分别是$SL(2)$和实$SL(2)$的参数。而$D^{(j)}$和$D^{(j)*}$对实参数$(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$来说都是解析函数，因而它们都是实$SL(2)$的解析表示。从而$D^{(j_1,j_2)}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$也是实$SL(2)$的解析表示。实$SL(2)$的元$e^{-i(\boldsymbol{a}-i\boldsymbol{b})\cdot\sigma/2}$也可写为2×2的幺模方阵

$$A=\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{pmatrix},\quad \alpha\delta-\beta\gamma=1 \tag{28.77}$$

则由21.5节中的分析，并用（8.77）取代其（21.35）式中的$\begin{pmatrix}\beta & \gamma\\ -\gamma^* & \beta^*\end{pmatrix}$，便可得出类似于(21.39)的式子。从而可知表示$D^{(j)}(A)$有性质

$$D^{(j)}(-A)=(-1)^{2j}D^{(j)}(A) \tag{28.78}$$

代入(28.64)可得

$$D^{(j_1,j_2)}(-A)=(-1)^{2(j_1+j_2)}D^{(j_1,j_2)}(A),$$
$$A\in 实SL(2) \qquad (28.79)$$

它们作为实$SL(2)$的表示都是单值的。另一方面，由于L_p的自然表示（即L_p本身的矩阵形式(6.32)）是一个4维不可约表示，故必与表示$D^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}$等价。因而不计一相似变换，即可将矩阵$D^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$视为$L_p$的元

$$L_p=\{D^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})\} \qquad (28.80)$$

而(28.76)又可写为

$$D^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}=A\otimes A^*=\begin{pmatrix}\alpha, & \beta\\ \gamma, & \delta\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}\alpha^*, & \beta^*\\ \gamma^*, & \delta^*\end{pmatrix} \qquad (28.81)$$

这表明L_p是实$SL(2)$的同态象。这同态是2对1的，即$\pm A$对应同一个$D^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}$ $\Bigg($由(28.81)易求出这一同态的核为$\left\{\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}, -\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\right\}\Bigg)$。所以，有同态关系：

$$D^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}\rightarrow\pm A\rightarrow\begin{cases}D^{(j_1,j_2)}(A)\\ (-1)^{2(j_1+j_2)}D^{(j_1,j_2)}(A)\end{cases} \qquad (28.82)$$

由此可知，$D^{(j_1,j_2)}$作为L_p的表示，当(j_1+j_2)为整数时是单值的，当(j_1+j_2)为半奇数时是双值的。例如，$D^{(\frac{1}{2},0)}$和$D^{(0,\frac{1}{2})}$是L_p的双值表示，$D^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}$是$L_p$的单值表示（都是实$SL(2)$的单值表示）。

这里指出，实$SL(2)$群与L_p的关系，同$SU(2)$与$SO(3)$的关系是相似的。两者的李代数同构，因而两个群局部同构；

但整体关系只是同态的，而且实 $SL(2)$ 两次复盖 L_p。作为实 $SL(2)$和L_p的局部表示，$D^{(j_1,j_2)}$ 都是单值的（注意A和$-A$当中只有一个在单位元I的领域内）；当解析地延拓为实$SL(2)$的表示时，它们仍是单值的（见(21.39)），但由于A和$-A$都是可取元（对应L_p的同一元），而$D^{(j_1,j_2)}$在A和$-A$处取值一般是不同的((28.79))，故作为L_p的（整体）表示时，一般将是双值的（在这两个值相同的情形，表示退化为单值的）。

L_p的复扩充为（同构于）$SO(4,C)$（见(28.69)），可见是二秩的半单李群，故有两个独立的不变算子。显然可将它们取为

$$\begin{cases} \hat{F}_1 = -\dfrac{1}{2}\hat{M}^2 \\ \hat{F}_2 = -\dfrac{1}{2}\hat{N}^2 \end{cases} \tag{28.83}$$

其本征值谱为

$$\begin{cases} \lambda_1 = \dfrac{1}{2}j_1(j_1+1) \\ \lambda_2 = \dfrac{1}{2}j_2(j_2+1) \end{cases} \tag{28.84}$$

L_p的不可约表示 $D^{(j_1,j_2)}$ 正是用与两个本征值相应的一对量子数(j_1, j_2)来标记的。与$D^{(j_1,j_2)}$相应的表示空间，便是$(\hat{F}_1,\hat{F}_2)$属于本征值(λ_1,λ_2)的本征子空间。卡塞米尔算子为

$$\hat{C} = -\frac{1}{2}(\hat{M}^2+\hat{N}^2) = \hat{F}_1+\hat{F}_2$$

$$= -\frac{1}{4}(\hat{I}^2-\hat{K}^2) \tag{28.85}$$

第六章 群论与量子力学

群论和群表示理论对于物理学来说十分重要。这是因为固体、分子、原子、原子核、基本粒子等重要的物理体系都具有十分丰富的对称性质，而群论和群论表示正是对这种对称性进行数学分析，从而揭示出其物理效应的有力工具。在量子物理中，群论方法显得更为重要。这首先是由于量子力学的数学结构与经典力学相比特别适合于运用群论方法，其次还由于量子力学的基本方程的求解问题除少数几个简单的特殊情况外，是超出现今数学的能力的，因而特别需要单从体系的对称性出发弄清尽可能多的物理性质或使方程简化；至于在实验数据较少而探索性更强的领域（如基本粒子的结构问题）里，对称性和对称分析的方法就更加重要了。在前几章中，已涉及到一些群论与物理问题的联系，本章中我们将比较系统地讨论如何用群论方法来处理物理学中特别是量子力学中的对称性问题。

§29 一些简单的应用例

29.1 物理张量的独立分量

如所周知，物理方程对某类变换的不变(协变)性质要求相应的物理量在变换下按张量的规律变换。特别地，在空间坐标系的转动和反演下，物理量应表现为张量或赝张量。我们知道（见 6.1 节中的讨论），参考坐标系的转动等同于物理空间(包括物理体系)沿反方向的转动而参考系不动（物理体系与参

考系的关系在两种情形下是相同的）；参考系的反演则等同于物理空间的反演。由此可见，三维物理空间中的张量和赝张量也可以用它在空间的转动及反演（参考系不动）下的变换性质来刻画。注意到空间转动和反演操作的群是 $O(3)=SO(3)\times C_i$，上述变换性质也就是在 $O(3)$ 的操作下的变换性质。设 A 为 $O(3)$ 的操作的矩阵形式，则 A 的全体形成 $O(3)$ 的自然表示，以下也用 A 代表这个表示。按定义，一个 n 阶的张量或赝张量 $T_{i_1i_2\cdots i_n}$，在操作 A 下应按如下的方式变换

$$T'_{i_1i_2\cdots i_n}=\sum_{j_1\cdots j_n}A_{i_1j_1}A_{i_2j_2}\cdots A_{i_nj_n}T_{j_1j_2\cdots j_n} \tag{29.1}$$

或

$$T'_{i_1i_2\cdots i_n}=\det(A)\cdot\sum_{j_1\cdots j_n}A_{i_1j_1}A_{i_2j_2}\cdots A_{i_nj_n}T_{j_1j_2\cdots j_n} \tag{29.2}$$

也可以说，n 阶张量按 A 的 n 次直积 A^n 变换，而 n 阶赝张量按 A 的 n 次直积与一维表示 $\det(A)$ 的直积 $\det(A)A^n$ 变换。

当物理体系具有一定的空间对称性时，描写其固有性质的物理张量其分量之间一般存在一些关系，使得它的分量当中只有一部分是独立的，而其余分量可由这些独立分量来表示。因而，我们能够从体系的对称性出发简化体系的一些物理张量（使其独立分量的数目最小）。这方面的简单例子已在3.2节中提及，现在可以建立用群论的概念来处理这类问题的一般方法。

设体系的点对称群为 G，显然 $G\subset O(3)$。G 中的操作使体系不变，因而也不会改变描写体系固有物理性质的张量的分量。例如，体系的惯量张量、弹性张量（4阶）、介电常数张量、压电系数张量（3阶）等，其分量在体系的点对称群的操

作下都是不变的。即有如下关系

$$T_{i_1\cdots i_n}=\sum_{j_1\cdots j_n}A_{i_1j_1}\cdots A_{i_nj_n}T_{j_1\cdots j_n}\times\left\{\begin{matrix}1\\ \det(A)\end{matrix}\right\},\ A\in G \tag{29.3}$$

上式是关于T的分量的方程组，其中所有的A_{ij}都是已知的，因对称群G算是已知的；它限制了T的独立分量的数目。一个浅显的例子是，当G中含有反演i时，把$A=i$代入(29.3)可得($A_{ij}=-\delta_{ij}$)

$$T_{i_1\cdots i_n}=T_{i_1\cdots i_n}\times\begin{cases}(-1)^n, & \text{当}T\text{为张量}\\ (-1)^{n+1}, & \text{当}T\text{为赝张量}\end{cases}$$

从而可知：具有空间反演对称性的物理体系，所有奇数阶的张量为零，所有偶数阶的赝张量为零。例如，由电极化强度是1阶张量（矢量）和胁强是2阶张量可知，联系二者的线性系数——压电系数必为3阶张量。由此即可断言，压电效应不可能存在于属于晶类C_i、C_{2h}、D_{2h}、C_{3i}、D_{3d}、C_{4h}、D_{4h}、C_{6h}、D_{6h}、T_h、O_h的晶体中（这11个晶类具有空间反演对称性）。

事实上，只需对群G的生成元写出方程(29.3)，因为G的任意元可写为生成元的乘积，只要(29.3)对全部生成元成立就对G的任意元成立（注意群表示的性质）。以G的生成元代入(29.3)的A，所得之方程组决定了G不变的张量或赝张量的分量之间的联系。由这组方程足以确定T张量的独立分量的个数，以及其他分量与所取独立分量的关系。但由群表示论可以给出一个解决此问题的更巧妙的方法。

(29.3)表明，每个G不变张量（作为G的表示空间中的矢量）在G的表示A^n或$\varepsilon_A A^n$($\varepsilon_A=\det A$)的作用下不变，因而生成一个一维不变子空间（它按G的单位表示变换）。根据20.3节中的结果，所有这样的张量$T^{(1)}$可由对称化算子

$$p^{(1)}=\frac{1}{N(G)}\sum_{A\in G}\hat{A}^n \quad 或 \quad \frac{1}{N(G)}\cdot\sum_{A\in G}\varepsilon_A\hat{A}^n$$

作用于一切T张量来生成

$$T^{(1)}=p^{(1)}T \tag{29.4}$$

上式的显式写法为

$$T^{(1)}_{i_1\cdots i_n}=\frac{1}{N(G)}\cdot\begin{cases}\sum\limits_A\sum\limits_{j_1\cdots j_n}A_{i_1j_1}\cdots A_{i_nj_n}T_{j_1\cdots j_n}, & 当T为张量\\ \sum\limits_A\varepsilon_A\sum\limits_{j_1\cdots j_n}A_{i_1j_1}\cdots A_{i_nj_n}T_{j_1\cdots j_n}, & 当T为赝张量\end{cases} \tag{29.5}$$

G不变张量的独立分量的个数q等于所有$T^{(1)}$形成的子空间的维数，也就是G的表示A^n或$\varepsilon_A A^n$当中含有单位表示的次数。因此，由(18.2)有（单位表示的$\chi^{(1)}(A)=1$）

$$q=\frac{1}{N(G)}(\chi',\ \chi^{(1)})=\frac{1}{N(G)}\sum_{A\in G}\chi'(A)$$

其中

$$\chi'(A)=\begin{cases}\chi^n(A), & 当T为张量\\ \varepsilon_A\chi^n(A), & 当T为赝张量\end{cases}$$

从而得到

$$q=\frac{1}{N(G)}\begin{cases}\sum\limits_{A\in G}\chi^n(A), & 当T为张量\\ \sum\limits_{A\in G}\varepsilon_A\chi^n(A), & 当T为赝张量\end{cases} \tag{29.6}$$

其中$\chi(A)$是G的自然表示的特征标，$\varepsilon_A=1$(当A是正常转动)或-1（当A是非正常转动）。因$A\in O(3)$，当以φ_A表示操作A的转角时，显然有

$$\chi(A)=\varepsilon_A(1+2\cos\varphi_A) \tag{29.7}$$

实际上的物理张量，除了在空间方面的G不变性之外，常常还具有对于指标置换方面的某些对称性。这时，张量独立分量的数目将进一步减小，因而公式(29.6)不能直接应用，需作

相应的修改。具有某种指标置换对称性的张量形成一般（没有这种对称性限制的）张量空间的一个子空间，由(29.1)和(29.2)可见，这些张量张成表示 A^n 或 $\varepsilon_A A^n$ 的一个不变子空间。这个子空间所荷载的G的表示是表示 A^n 或$\varepsilon_A A^n$ 的一个缩小，它所包含的G的单位表示的次数即为G不变的且是具有给定置换对称性的线性独立张量的个数，亦即这种张量的独立分量的个数。所以，问题在于确定上述缩小表示的特征标。例如，对于2阶对称张量有

$$T_{ij}=T_{ji}$$

九个分量中只有六个是独立的（通常取为 $i\leqslant j$ 的六个），张成九维张量空间的一个六维子空间。由(29.1)可知，A^2在这个六维子空间上的缩小可写为

$$T'_{ij}=\sum_k A_{ik}A_{jk}T_{kk}+\sum_{k<l}(A_{ik}A_{jl}+A_{il}A_{jk})T_{kl} \qquad (i\leqslant j)$$

其特征标为

$$\begin{aligned}\chi^s(A)&=\sum_i A_{ii}^2+\sum_{i<j}(A_{ii}A_{jj}+A_{ij}A_{ji})\\&=\sum_i A_{ii}^2+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}(A_{ii}A_{jj}+A_{ij}A_{ji})\\&=\frac{1}{2}\sum_{i,j}(A_{ii}A_{jj}+A_{ij}A_{ji})\\&=\frac{1}{2}[\chi^2(A)+\chi(A)^2]\end{aligned} \tag{29.8}$$

所以有

$$q^s=\frac{1}{2N(G)}\cdot\sum_{A\in G}[\chi^2(A)+\chi(A^2)] \tag{29.9}$$

同样，对于反对称张量，有

$$\chi^a(A)=\frac{1}{2}[\chi^2(A)-\chi(A)^2] \tag{29.10}$$

$$q^{a}=\frac{1}{2N(G)}\cdot\sum_{A\in G}[\chi^{2}(A)-\chi(A^{2})] \qquad (29.11)$$

由(29.7)和(29.9)容易算出具有高级、中级和低级点群的对称性的晶体其2阶对称张量的独立分量的个数，分别为

高级点群（立方晶系）		1
中级点群（六方、四方、三方晶系）		2
低级点群	正交晶系	3
	单斜晶系	4
	三斜晶系	6

注意，这里所说的的独立分量是相对于任意坐标系而言的。

29.2 分子中的振动模式

在考虑N原子分子中原子的运动时，可将每个原子看作一个质点，而整个分子则可看作是相互作用着的N个质点的点系。在2.2节中，我们已写出了这个质点系在内力作用下的运动方程(2.9)、(2.10)，其中q_i表原子对平衡位置的微小位移坐标，x_i^0表示原子平衡位置（初始位置）的坐标。方程(2.9)或写为分量形式的方程组

$$\ddot{q}_i+\sum_j f_{ij}q_j=0 \qquad (29.12)$$

表明，N个原子或$3N$个坐标q_i的运动一般是相互关联的。由于实对称矩阵$F=(f_{ij})$总可通过实相似变换加以对角化，上方程能够化为关于新坐标（广义坐标）变量u_i的彼此独立的运动方程。设$S=(S_{ij})$是使F对角化的相似变换的矩阵，令$u_i=\sum_j S_{ij}q_j$或$U=SQ$，以S左乘运动方程(2.9)，得

$$\frac{d^2}{dt^2}U+SFS^{-1}U=0$$

而

$$SFS^{-1}=\begin{pmatrix} f_1 & & & 0 \\ & f_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & f_{3N} \end{pmatrix}$$

其中 f_i 是F的本征值，记 $f_i=\omega_i^2$，则U的方程化为

$$\ddot{u}_i+\omega_i^2 u_i=0,\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ 3N \qquad (29.13)$$

可见 u_i 彼此独立，分别以频率 ω_i（圆频）作谐振动（$\omega=0$ 的谐振动定义为匀速运动）。以 $S^{-1}=(S_{ij}^{-1})$表S的逆矩阵，可解出

$$q_i=\sum_j S_{ij}^{-1}u_j \qquad (Q=S^{-1}U) \qquad (29.14)$$

坐标u_i常被称为体系的简正坐标。每一个简正坐标决定着体系的一种基本振动模式。例如，在(29.14)中取$u_1\neq 0$，$u_2=u_3=\cdots=u_{3N}=0$，便得到由简正坐标u_1所决定的振动模式

$$q_i^{(1)}=S_{i1}^{-1}u_1 \qquad (29.15)$$

代回(29.14)，又有

$$q_i=\sum_j q_i^{(j)} \qquad (29.16)$$

这表明，体系的一般运动是$3N$个独立的基本振动模式的迭加，振动模式 $q_i^{(j)}$（或 $Q^{(j)}$）的谐振频率为 ω_j（即u_j 的频率）。当F的本征值有简并（重复）时，具有同一频率的独立模式的数目等于其简并度（重复数）。

以上的分析表明，分子中的原子（有内力的质点系）的微小运动问题，可完全归结为确定其所有独立振动模式的问题。相应的数学问题是：求出使F矩阵对角化的变换矩阵S或求解F的本征值与本征矢。由于多原子分子中的原子数$N\geqslant 3$，矩阵F的阶数就高于9($3N$)，所以直接求解上述问题很不方便，但利用分子的点对称性却能使这一问题大为简化。

设分子的点群为$G=\{g\}$，则在2.2节中已经表明，在操作g下，位移坐标Q将按G的一个$3N$维表示$A(g)$变换，且

$A(g)$与F对易(见(2.14)、(2.16)、(2.18)，其中的$S(g)$现改写为$A(g)$)。表示A一般是可约的，我们将它约化。这意味着要对位移坐标g_i进行重新组合，使组合后的新坐标分组按G的不可约表示变换。因为G的不可约表示的完整表是已知的，易写出在20.2节中定义过的对称化算子，从而可用20.3节中所建立的方法来实现表示A的约化，作出按G的不可约表示变换的对称坐标。这也就是将分子的坐标按在G下的变换性质进行分类（或按分子的点对称性分类）。以$u_{pl}^{(i)}$表示按G的不可约表示$A^{(i)}$的第l行变换的坐标(p是$A^{(i)}$在A的约化中的重复脚标)。因在此坐标系下A是完全约化的，而F是与表示A可易的，则由14.2节的基本结果可知，变到坐标系$\{u_{pl}^{(i)}\}$后的F矩阵形如（见(14.25))

$$F_{ipl,i'p'l'}=f_{pp'}^{(i)}\cdot\delta_{ii'}\cdot\delta_{ll'} \qquad (29.17)$$

这表明F已经大部分（对主要脚标i和l）对角化了，F的完全对角化问题被简化为一些a_i($A^{(i)}$在A中的重复度）阶的对角子块($f_{pp'}^{(i)}$)的对角化问题(见(14.26——(14.28))，而简正坐标将由对称坐标$u_{pl}^{(i)}$对脚标p进行组合得出。实际上重要的是$A^{(i)}$在A中的重复度不超过1的情形。这时无需引入脚标p，对称坐标$u_l^{(i)}$即是简正坐标，而F是完全对角化的

$$F_{il,i'l'}=f^{(i)}\cdot\delta_{ii'}\cdot\delta_{ll'} \qquad (29.18)$$

值得注意的是，这时的简正坐标$u_l^{(i)}$的构成及式(29.18)是单由体系的对称性决定的，体系内力的性质只参与决定$f^{(i)}=\omega_i^2$的数值。这就是说：体系的几何性质(对称性)规定着它有多少个固有频率，每个频率的简并度（表示$A^{(i)}$的维数），以及相应的振动模式；而其物理性质则规定固有频率的具体数值。

作为例子，考虑位于等边三角形三个顶点上由三个相同原子组成的分子。这种类型分子的对称群是$D_{3h}=C_{3v}\times C_s$，C_{3v}的三次转轴垂直于分子平面并通过分子的中心(即点群的中心)，

的映面为分子平面。三个原子的位移坐标为 $\delta\boldsymbol{r}_1=(q_1,q_2,q_3)$，$\delta\boldsymbol{r}_2=(q_4,q_5,q_6)$，$\delta\boldsymbol{r}_3=(q_7,q_8,q_9)$，其中 $\delta\boldsymbol{r}_i$ 和 $\delta\boldsymbol{r}'_i$ 均表示位于第 i 个位置上的原子的微小位移。在 D_{3h} 的操作 g 下，位移 $\delta\boldsymbol{r}_i$ 实际上经历两种变换：它的起点 i 被搬到点 gi；$\delta\boldsymbol{r}_i$ 的方向经转动 g（正常的或非正常的）变为 $g\delta\boldsymbol{r}_i$。因此，变换后 gi 点的位移 $\delta\boldsymbol{r}'_{gi}$ 等于变换前 i 点的位移 $\delta\boldsymbol{r}_i$ 作转动 g，即 $\delta\boldsymbol{r}'_{gi}=g\delta\boldsymbol{r}_i(g\in D_{3h})$，或写为（令 $gi\to i$，则 $i\to g^{-1}i$）

$$\delta\boldsymbol{r}'_i=g\delta\boldsymbol{r}_{g^{-1}i}\qquad,\ g\in D_{3h}\tag{29.19}$$

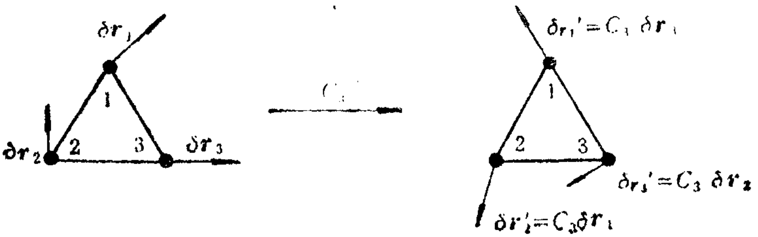


图 29.1 操作 C_3

图29.1示出了在操作 $g=C_3$ 下的变换情形。g 对 i 的作用相当于一个置换，显然有下列关系

$$\begin{cases}C_3\sim(123) & C_3^2\sim(132) & \sigma_v^{(1)}\sim(23)\\ \sigma_v^{(2)}\sim(13) & \sigma_v^{(3)}\sim(12) & \sigma_h\sim(1)\end{cases}\tag{29.20}$$

D_{3h} 有六个类，可写 $D_{3h}=\{I,2C_3,3\sigma_v,\sigma_h,\ 2C_3\sigma_h,3\sigma_v\sigma_h\}$。不难算出由(29.19)所确定的 D_{3h} 的一个九维表示的特征标，这时对位移坐标使用双脚标较为方便

$$\begin{cases}\delta\boldsymbol{r}_1=(q_{11},\ q_{12},\ q_{13})\\ \delta\boldsymbol{r}_2=(q_{21},\ q_{22},\ q_{23})\\ \delta\boldsymbol{r}_3=(q_{31},\ q_{32},\ q_{33})\end{cases}\tag{29.21}$$

设 D_{3h} 的自然表示矩阵为 $D(g)$，则由(29.21)，(29.19)可明

显地写为

$$q'_{i,l}=\sum_{l'} C_{l,l'}(g)q_{g^{-1}i,l'} \tag{29.22}$$

从而可写出九维表示的特征标

$$\chi(g)=\sum_{i,l}\delta_{i,g^{-1}i}D_{ll}(g)=(\sum_i\delta_{gi,i})\cdot\sum_l D_{ll}(g)$$
$$=(\sum_i\delta_{gi,i})\cdot\chi_D(g) \tag{29.23}$$

其中 $\chi_D(g)$表示 D_{3h} 的自然表示的特征标，可用(29.7)式计算

$$\chi_D(g)=\varepsilon_g(1+2\cos\varphi_g) \tag{29.24}$$

由(29.20)、(29.24)和(29.23)易算出特征标 $\chi(g)$的值。另一方面，由已知的 C_{3v} 的单纯特征标和C_s的单纯特征标的乘积，即可写出 D_{3h} 的单纯特征标。现将它们的数值列于下表。

D_{3h}	I	$2C_3$	$3\sigma_v$	σ_h	$2C_3\sigma_h$	$3\sigma_v\sigma_h$
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	1	-1	1	1	-1
$\chi^{(3)}$	2	-1	0	2	-1	0
$\chi^{(4)}$	1	1	1	-1	-1	-1
$\chi^{(5)}$	1	1	-1	-1	-1	1
$\chi^{(6)}$	2	-1	0	-2	1	0
χ	9	0	1	8	0	-1

利用重复度公式(18.2)

$$a_i=\frac{1}{12}\sum_{g\in D_{3h}}\chi(g)\chi^{(i)}(g)$$

由上表得出

$$
\begin{cases} a_1 = a_2 = a_4 = a_6 = 1, \\ a_3 = 2, \ a_5 = 0 \end{cases} \tag{29.25}
$$

D_{3h} 的不可约表示完整表可由已知的 C_{3v}和 C_s 的不可约表示的直积给出（C_s 只有两个一维不可约表示），据此不难写出 D_{3h} 的各对称化算子。参照 C_{3v} 的对称化算子（20.22），可将 D_{3h} 的各对称化算子的组合系数列于下表

D_{3h}	I	C_3	C_3^2	σ_1	σ_2	σ_3	σ_h	$C_3\sigma_h$	$C_3^2\sigma_h$	$\sigma_1\sigma_h$	$\sigma_2\sigma_h$	$\sigma_3\sigma_h$
$\hat{p}^{(1)}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$
$\hat{p}^{(2)}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$
$\hat{p}_{11}^{(3)}$	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$\frac{1}{6}$
$\hat{p}_{22}^{(3)}$	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{6}$
$\hat{p}_{12}^{(3)}$	0	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	0	0	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	0
$\hat{p}_{21}^{(3)}$	0	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	0	0	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	0
$\hat{p}^{(4)}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$
$\hat{p}^{(5)}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$
$\hat{p}_{11}^{(6)}$	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{6}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{6}$
$\hat{p}_{22}^{(6)}$	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{6}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{12}$	$\frac{1}{6}$
$\hat{p}_{12}^{(6)}$	0	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	0	0	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	0
$\hat{p}_{21}^{(6)}$	0	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	0	0	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	$\frac{\sqrt{3}}{12}$	$-\frac{\sqrt{3}}{12}$	0

每个 p 算子是群元算子 $\hat{g}$ 的组合，其组合系数由表中相应的行给出。而 $\hat{g}$ 是作用于九维表示空间$\{Q\}$上的，它对Q矢量坐标的变换（将 q_i 变为 q_i'）由(29.22)决定。也可形式地将(29.22)写为

$$\hat{g}q_{i,l}=\sum_{l'}D_{ll'}(g)q_{g^{-1}i,l'} \tag{29.26}$$

从而利用此式和上表便可写出各个 p 算子对 q 坐标的变换。D_{3h} 的自然表示矩阵 $D(g)$不难写出。显然其前 6 个矩阵构成子群 C_{3v} 的自然表示，这已在11.1节中写出，即

$$D(I)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\qquad D(C_3)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}&0\\\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

$$D(C_3^2)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}&0\\-\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}&0\\0&0&1\end{pmatrix}\qquad D(\sigma_1)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}&0\\-\frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

$$D(\sigma_2)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}&0\\\frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}&0\\0&0&1\end{pmatrix}\qquad D(\sigma_3)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

注意到

$$D(\sigma_h)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}.$$

便可知道其余的6个矩阵只是将相应的前6个矩阵右下角的1改为(-1)。

由(29.25)知，需要建立的九个对称坐标是：$u^{(1)}$，$u^{(2)}$，$u^{(4)}$，$u_1^{(6)}$，$u_2^{(6)}$，$u_{11}^{(6)}$，$u_{12}^{(3)}$，$u_{21}^{(3)}$，$u_{22}^{(3)}$。由九个相应的对称化算子得出（注意，因坐标按算子矩阵的行变换，与此相应地$\hat{p}_{nm}^{(i)}$的行标n对应于坐标$u_{pn}^{(i)}$的行标n）

$$
\left\{
\begin{aligned}
u^{(1)} &= \hat{p}^{(1)}q_{11} = \frac{1}{12}q_{11} - \frac{\sqrt{3}}{12}q_{12} + \frac{1}{12}q_{21} + \frac{\sqrt{3}}{12}q_{22} - \frac{1}{6}q_{31} \\
u^{(2)} &= \hat{p}^{(2)}q_{11} = \frac{1}{4}q_{11} + \frac{\sqrt{3}}{12}q_{12} - \frac{1}{4}q_{21} \\
&\qquad + \frac{\sqrt{3}}{12}q_{22} - \frac{\sqrt{3}}{6}q_{32} \\
u_{11}^{(3)} &= \hat{p}_{11}^{(3)}q_{11} = \frac{5}{12}q_{11} + \frac{\sqrt{3}}{12}q_{12} + \frac{5}{12}q_{21} - \frac{\sqrt{3}}{12}q_{22} + \frac{1}{6}q_{31} \\
u_{12}^{(3)} &= \hat{p}_{21}^{(3)}q_{11} = \frac{\sqrt{3}}{12}q_{11} + \frac{1}{4}q_{12} - \frac{\sqrt{3}}{12}q_{21} + \frac{1}{4}q_{22} + \frac{1}{2}q_{32} \\
u_{21}^{(3)} &= \hat{p}_{12}^{(3)}q_{11} = \frac{\sqrt{3}}{12}q_{11} + \frac{1}{4}q_{12} + \frac{\sqrt{3}}{12}q_{21} \\
&\qquad - \frac{1}{4}q_{22} - \frac{\sqrt{3}}{6}q_{31} \\
u_{22}^{(3)} &= \hat{p}_{22}^{(3)}q_{11} = \frac{1}{4}q_{11} - \frac{\sqrt{3}}{12}q_{12} - \frac{1}{4}q_{21} - \frac{\sqrt{3}}{12}q_{22} \\
&\qquad + \frac{\sqrt{3}}{6}q_{32} \\
u^{(4)} &= \hat{p}^{(4)}q_{13} = \frac{1}{3}q_{13} + \frac{1}{3}q_{23} + \frac{1}{3}q_{33} \\
u_1^{(6)} &= \hat{p}_{11}^{(6)}q_{13} = \frac{1}{6}q_{13} + \frac{1}{6}q_{23} - \frac{1}{3}q_{33}
\end{aligned}
\right.
$$

$$u_2^{(6)} = p_{21}^{(6)} q_{13} = -\frac{\sqrt{3}}{6} q_{13} + \frac{\sqrt{3}}{6} q_{23}$$

(29.27)

这就完成了九维表示空间的约化，得到六个不可约子空间，它们分别按 D_{3h} 的不可约表示 $A^{(1)}$，$A^{(2)}$，$A^{(3)}$，$A^{(3)}$，$A^{(4)}$，$A^{(6)}$ 变换，(19.27)给出了各子空间的标准基。

容易验证，(29.27) 中的变换系数对于 $u_{pn}^{(i)}$ 的指标 i 和 n 是正交的。这是由 $p_{nm}^{(i)}$ 的定义以及不可约表示阵元作为群元的函数的正交性、变换 (29.26) 的正交性所决定的（请读者加以证明）。但对于指标 p，一般并不存在这种正交性。事实上，由于 $A^{(3)}$在约化中出现两次，$(u_{11}^{(3)}, u_{12}^{(3)})$和$(u_{21}^{(3)}, u_{22}^{(3)})$的选择并不是唯一的，因为

$$\begin{pmatrix} v_{11}^{(3)} \\ v_{12}^{(3)} \end{pmatrix} = a\begin{pmatrix} u_{11}^{(3)} \\ u_{12}^{(3)} \end{pmatrix} + b\begin{pmatrix} u_{21}^{(3)} \\ u_{22}^{(3)} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} v_{21}^{(3)} \\ v_{22}^{(3)} \end{pmatrix} = c\begin{pmatrix} u_{11}^{(3)} \\ u_{12}^{(3)} \end{pmatrix} + d\begin{pmatrix} u_{21}^{(3)} \\ u_{22}^{(3)} \end{pmatrix}$$

显然也按表示 $A^{(3)}$变换。为了保证四个 v 坐标的独立性，只需取 $\det\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \neq 0$。利用这一任意性，我们可以使变换系数对于 u（或 v）的 p 脚标也是正交的。例如，为了使四个 $v_{pn}^{(3)}$ 的变换系数是正交归一的，由(29.27)可知，只需令

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{3} & -1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

对其余的五个 $u_{pn}^{(i)}$ 分别乘以系数的归一化常数，便得归一化的 $v_{pn}^{(i)}$。总之有

$$
\left\{
\begin{aligned}
v^{(1)} &= \frac{\sqrt{3}}{6}q_{11} - \frac{1}{2}q_{12} + \frac{\sqrt{3}}{6}q_{21} + \frac{1}{2}q_{22} - \frac{\sqrt{3}}{3}q_{31} \\
v^{(2)} &= \frac{1}{2}q_{11} + \frac{\sqrt{3}}{6}q_{12} - \frac{1}{2}q_{21} + \frac{\sqrt{3}}{6}q_{22} - \frac{\sqrt{3}}{3}q_{32} \\
v_{11}^{(3)} &= \frac{\sqrt{3}}{3}(q_{11} + q_{21} + q_{31}) \\
v_{12}^{(3)} &= \frac{\sqrt{3}}{3}(q_{12} + q_{22} + q_{32}) \\
v_{21}^{(3)} &= \frac{\sqrt{3}}{6}q_{11} + \frac{1}{2}q_{12} + \frac{\sqrt{3}}{6}q_{21} - \frac{1}{2}q_{22} - \frac{\sqrt{3}}{3}q_{31} \\
v_{22}^{(3)} &= \frac{1}{2}q_{11} - \frac{\sqrt{3}}{6}q_{12} - \frac{1}{2}q_{21} - \frac{\sqrt{3}}{6}q_{22} + \frac{\sqrt{3}}{3}q_{32} \\
v^{(4)} &= \frac{\sqrt{3}}{3}(q_{13} + q_{23} + q_{33}) \\
v_{1}^{(6)} &= \frac{\sqrt{6}}{6}q_{13} + \frac{\sqrt{6}}{6}q_{23} - \frac{\sqrt{6}}{3}q_{33} \\
v_{2}^{(6)} &= -\frac{\sqrt{2}}{2}q_{13} + \frac{\sqrt{2}}{2}q_{23}
\end{aligned}
\right.
\tag{29.28}
$$

将上式写为矩阵形式 $V=SQ$，则 S 是正交矩阵（$S^{-1}=\tilde{S}$），故容易解出 $Q=\tilde{S}V$。即有

$$
q_i=\sum_j \tilde{S}_{ij}v_j=\sum_j S_{ji}v_j \tag{29.29}
$$

其中对坐标 q 和 v 都采用顺序脚标，S_{ij} 是式(29.28)中的变换系数。对称坐标 v 即是体系的简正坐标。

现在由(29.29)来讨论各谐振模式的图象。令$(v_1, v_2, \cdots, v_9)$中的 v_i 除 v_l 外全为零，便得 v_l 的振动模式

$$
q_i^{(l)}=S_{li}v_l \tag{29.30}
$$

在上式中取 $l=3$ 得到 $v_{11}^{(3)}$ 模式的图象

$$\begin{cases}\delta r_1^{(3)}=\dfrac{\sqrt{3}}{3}(1,0,0)\cdot v_{11}^{(3)}\\ \delta r_2^{(3)}=\dfrac{\sqrt{3}}{3}(1,0,0)\cdot v_{11}^{(3)}\\ \delta r_3^{(3)}=\dfrac{\sqrt{3}}{3}(1,0,0)\cdot v_{11}^{(3)}\end{cases}\tag{29.31}$$

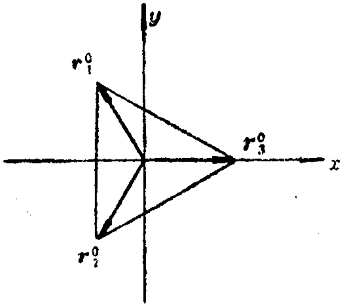
这显然是体系沿 x 方向的平移运动。同样地，$v_{12}^{(3)}$ 和 $v^{(4)}$（$l=4$ 和 7）分别代表体系沿 y 方向和 z 方向的平移运动。在(29.30)中取 $l=2$，得出模式 $v^{(2)}$ 的图象

$$\begin{cases}\delta \boldsymbol{r}_1^{(2)}=\left(\dfrac{1}{2},\ \dfrac{\sqrt{3}}{6},\ 0\right)v^{(2)}\\ \delta \boldsymbol{r}_2^{(2)}=\left(-\dfrac{1}{2},\ \dfrac{\sqrt{3}}{6},\ 0\right)v^{(2)}\\ \delta \boldsymbol{r}_3^{(2)}=\left(0,\ -\dfrac{\sqrt{3}}{3},\ 0\right)v^{(2)}\end{cases}$$

或用原子的平衡位置坐标 $\boldsymbol{r}_1^0$，$\boldsymbol{r}_2^0$，$\boldsymbol{r}_3^0$ 表为

$$\begin{cases}\delta \boldsymbol{r}_1^{(2)}=\left(-\dfrac{v^{(2)}}{\sqrt{3}}\boldsymbol{z}_0\right)\times \boldsymbol{r}_1^0\\ \delta \boldsymbol{r}_2^{(2)}=\left(-\dfrac{v^{(2)}}{\sqrt{3}}\boldsymbol{z}_0\right)\times \boldsymbol{r}_2^0\\ \delta \boldsymbol{r}_3^{(2)}=\left(-\dfrac{v^{(2)}}{\sqrt{3}}\boldsymbol{z}_0\right)\times \boldsymbol{r}_3^0\end{cases}\tag{29.32}$$

其中 $\boldsymbol{z}_0$ 为 z 方向上的单位矢量，$\boldsymbol{r}_i^0$ 的分量是相对于写出 D_{jk} 的自然表示矩阵的那个坐标轴（如图29.2）写出的。(29.32)显然为体系绕 z 轴的转动运动$\left(\text{角位移为} -\dfrac{v^{(2)}}{\sqrt{3}}\boldsymbol{z}_0\right)$。同样可知，模



$$r_1^0=\left(-\frac{1}{2},\ \frac{\sqrt{3}}{2},\ 0\right)$$

$$r_2^0=\left(-\frac{1}{2},\ -\frac{\sqrt{3}}{2},\ 0\right)$$

$$r_3^0=(1,0,0)$$

图 29.2 原子的平衡位置

式 $v_1^{(6)}$ 和 $v_2^{(6)}$ 分别为体系绕 y 轴和绕 x 轴的转动运动。剩下的三个模式才是真正的振动。

在(29.30)中取 $l=1$，得出 $v^{(1)}$的模式

$$\begin{cases}\delta r_1^{(1)}=\left(\dfrac{\sqrt{3}}{6},\ -\dfrac{1}{2},\ 0\right)v^{(1)}\\ \delta r_2^{(1)}=\left(\dfrac{\sqrt{3}}{6},\ \dfrac{1}{2},\ 0\right)v^{(1)}\\ \delta r_3^{(1)}=\left(-\dfrac{\sqrt{3}}{3},\ 0,\ 0\right)v^{(1)}\end{cases}\tag{29.33}$$

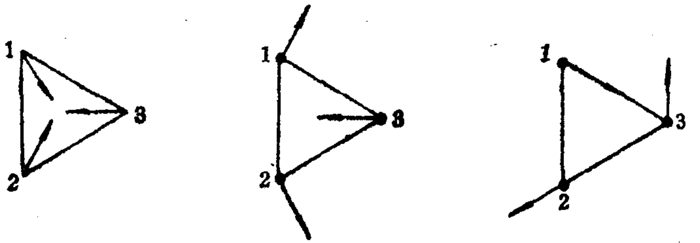
其振动位移图如图29.3所示。

在(29.30)中分别取 $l=5$ 和 $l=6$，得出 $v_{21}^{(3)}$和 $v_{22}^{(3)}$的振动模式

$$\begin{cases}\delta r_1^{(5)}=\left(\dfrac{\sqrt{3}}{6},\ \dfrac{1}{2},\ 0\right)v_{21}^{(3)}\\ \delta r_2^{(5)}=\left(\dfrac{\sqrt{3}}{6},\ -\dfrac{1}{2},\ 0\right)v_{21}^{(3)}\\ \delta r_3^{(5)}=\left(-\dfrac{\sqrt{3}}{3},\ 0,\ 0\right)v_{21}^{(3)}\end{cases}\tag{29.34}$$

$$\left\{\begin{aligned} \delta r_1^{(6)} &= \left(\frac{1}{2},\ -\frac{\sqrt{3}}{6},\ 0\right) v_{22}^{(3)} \\ \delta r_2^{(6)} &= \left(-\frac{1}{2},\ -\frac{\sqrt{3}}{6},\ 0\right) v_{22}^{(3)} \\ \delta r_3^{(6)} &= \left(0,\ \frac{\sqrt{3}}{3},\ 0\right) v_{22}^{(3)} \end{aligned}\right. \tag{29.35}$$

相应的位移图如图29.3所示。



$l=1$　　$l=5$　　$l=6$

图 29.3　分子的振动模式

总之，有三个移动模式，三个转动模式，三个振动模式。体系的一般微小运动是这九个独立的基本“振动”模式的迭加。显然，移动模式和转动模式的频率都是零（无外力），所以只需计算三个振动模式的频率。$v^{(1)}$的频率ω_1

$$\omega_1^2 = \sum_{ij} S_{1i} f_{ij} S_{j1}^{-1} = \sum_{ij} S_{1i} S_{1j} f_{ij} \tag{29.36}$$

其中S仍是(29.28)的变换系数矩阵。$v_{21}^{(3)}$和$v_{22}^{(3)}$属于同一不可约表示$A^{(3)}$，所以有相同的频率ω_2（二度简并）

$$\omega_2^2 = \sum_{ij} S_{5i} S_{5j} f_{ij} \tag{29.37}$$

在上面这个例子中，我们对分子的全部自由度进行了彻底的群分类。这在实际上是不必要的，因为我们可以事先将平凡的移动和转动自由度分离出去，而只考虑真正的振动模式。我

们知道，平动位移和转动角位移分别为三维空间中的矢量和赝矢量，因而在 D_{3h} 的操作下它们分别按自然表示$D(g)$和表示$D'(g)=\chi^{(5)}(g)D(g)$变换。利用前面给出的 D_{3h} 的单纯特征标表和自然表示的特征标，可得到

$$D(g)=A^{(3)}(g)\oplus A^{(4)}(g) \tag{29.38}$$

$$D'(g)=A^{(6)}(g)\oplus A^{(2)}(g) \tag{29.39}$$

由此可见，平移坐标和角位移坐标分别按 $A^{(3)}\oplus A^{(4)}$ 和 $A^{(6)}\oplus A^{(2)}$变换。因而不必考虑$A^{(2)}$, $A^{(4)}$, $A^{(6)}$和一个$A^{(3)}$($A^{(3)}$出现两次）的基，而只作出 $A^{(1)}$和另一个 $A^{(3)}$的基 $v^{(1)}$，$v^{(3)}_{21}$，$v^{(3)}_{22}$ 即可。这样便可迅速地得出三个振动模式和相应的频率公式。这时要留意的是，$u^{(3)}_{21}=p^{(3)}_{12}q$ 中的 q 必须选得使 $u^{(3)}_{21}$的系数与平移 $\lambda(q_{11}+q_{21}+q_{31})$的系数是正交的。这就可以保证($u^{(3)}_{21}$, $u^{(3)}_{22}$)中不再含有平移成分。

最后需指出，在本节中所讨论的问题的数学提法，是具有一定的对称群的算子的本征值问题。我们看到，通过群论方法可以将这个算子所作用的矢量空间的基按其变换性质来分类，即作出对称基（或对称坐标）。结果，本征值问题将得到部分解决（对只出现一次的不可约成分，相应的对称基即是属于同一本征值的独立本征矢，表示的维数即该本征值的简并度，而本征值的公式如(29.36)式），其余部分（不可约成分出现一次以上）则被简化。所以本节中所详细阐述的方法适用于所有对称本征值问题（有限维空间），例如量子力学中的定态微扰论。

§ 30 对称性与守恒定律

30.1 李群的生成元与守恒的力学量

在 1.3 节中已经表明，（量子）体系的运动方程（哈密顿算子）对于空间平移的不变性导致了体系的动量守恒，对于空间转动的不变性导致了角动量守恒，对于空间反演的不变性导

致了宇称守恒。平移不变性意味着空间的平移群是体系的对称群，平移群的元在态矢空间中表现为平移算子(1.7)，其无穷小生成元（无穷小算子）为 $-\nabla=-\frac{i}{\hbar}\hat{P}$。空间转动与反演不变性则表示群 $O(3)$ 是体系的对称群，$O(3)$ 在态矢空间中的表现则由(1.9)和(1.6)来刻画，其中 $O(3)$ 的生成元为(见9.2节) $-\boldsymbol{r}\times\nabla=-\frac{i}{\hbar}\hat{L}$，$\hat{i}$（反演 i 的算子 $\hat{i}$ 即宇称算子)。可见，以上这些守恒的力学量都是体系的对称李群的生成元（差一常因子）。需要指出，这只是下述一般情形的特例。

设 G 是体系的对称李群，并假定 G 在体系的态矢空间中总表现为一个幺正算子群 $\{\hat{g}\}$

$$\hat{g}^{+}\hat{g}=\hat{g}\hat{g}^{+}=1 \tag{30.1}$$

如以 I_i 表 G 的无穷小生成元（相对于群参数 u_i），则在单位元的邻域中有

$$\hat{g}=e^{\sum\limits_{i}\hat{I}_i u_i} \tag{30.2}$$

注意到 u_i 是独立的实参数，将(30.2)代入(30.1)可得

$$\hat{I}_l^{+}+\hat{I}_l=0 \tag{30.3}$$

即 $\hat{I}_l$ 都是反厄米的。于是 $(i\hat{I}_l)$ 都是厄米的

$$(i\hat{I}_l)^{+}=(i\hat{I}_l) \tag{30.4}$$

所以，体系的实 n 维对称李群对应的幺正算子群的 n 个无穷小生成元给出（乘以虚数单位 i ）作用于态矢空间上的 n 个线性独立的厄米算子——力学量；而这些力学量都是运动积分

$$\frac{d}{dt}(i\hat{I}_l)=\frac{1}{i\hbar}[(i\hat{I}_l),\ \hat{H}]=0$$

(注意(1.14)和(30.2))。

反之，由一组对易子积封闭的彼此独立的运动积分也可导出体系的一个（局部）对称李群。设$\hat{F}_1$，$\hat{F}_2$，…，$\hat{F}_n$是一组独立运动积分（守恒量）

$$\hat{F}_l^+=\hat{F}_l$$

$$[\hat{F}_l,\ \hat{H}]=0$$

假定其对易子积在它们所张成的线性空间中是封闭的

$$[\hat{F}_i,\ \hat{F}_j]=\sum_k C_{ij}^k\hat{F}_k$$

则以$\{\hat{F}_i\}$为无穷小生成元（可差一常因子）的幺正变换李群的元可写为（在单位元的邻域）

$$\hat{g}=e^{-i\sum_l \hat{F}_l u_l}$$

这个李群的结构常数便是C_{ij}^k。

体系的对称李群的生成元与运动积分的上述关系表明，体系的一定的对称性是与一定的守恒定律相关联的，或者说两者是相互决定的。例如，体系的旋转($SO(3)$)对称性蕴含着其角动量守恒，反之亦然。这种联系也为从物理测量上去判定体系是否具有某种对称性提供了理论依据（例如，关于弱作用中宇称不守恒的实验,也就否定了弱作用对于空间反演的不变性)；而一旦证实了体系具有某种对称性，就可以由群论引出（比守恒定律）更多的物理结论。这种考虑在粒子物理中具有重要意义。

下面以氢原子为例，来说明如何由体系的守恒量（运动积分）出发作出一个（最大的）封闭代数，并由这个李代数生成体系的一个（最大）对称李群。

氢原子的哈密顿算符是

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r} \tag{30.5}$$

先找出体系的全部守恒量。$\hat{H}$本身是一个运动积分，它对应于体系对时间平移的不变性。由与 1.3 节中对空间平移的同样的考虑，将(1.7)中的 x 改为 t，便得出时间的平移算子

$$\hat{g}(\tau)=e^{-\tau\frac{\partial}{\partial t}} \tag{30.6}$$

又由运动方程，有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}=\hat{H} \tag{30.7}$$

(30.6)也可写为

$$\hat{g}(\tau)=e^{i\tau\hat{H}/\hbar} \tag{30.8}$$

其中实参数 τ 表示时间平移量。$\hat{g}(\tau)$形成由$\hat{H}$所生成的一个一维对称李群。因为$\hat{g}(\tau)$与所有运动积分可易，因而也与体系的完全对称群的所有群元可易。所以这个一维李群总可以作为一个直积因子从完全对称群中分离出去，且由于它对所有体系都存在而可以不加考虑。除$\hat{H}$之外其它的运动恒量，我们已知有角动量$\hat{\boldsymbol{L}}$。$\hat{\boldsymbol{L}}$的三个分量的对易子积是封闭的，形成 $SO(3)$的李代数，生成的对称群即为已知的 $SO(3)$（同构于$SO(3)$的幺正算子群：$\hat{g}(\boldsymbol{\alpha})=e^{-i\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}/\hbar}$)但除角动量以外，体系还存在其他独立的运动恒量，因而$SO(3)$只是氢原子更大的对称群的一个子群。

为了找出独立于$\hat{\boldsymbol{L}}$的运动恒量，可先借助于经典的考虑。从经典力学知道，只有在牛顿型（库仑型）势场 $V(r)=-\dfrac{K}{r}$ 中运动的粒子才可能有闭合的椭圆轨道。当势能对于上述形式有所偏离时，将引起椭圆的长轴在椭圆平面内进动，从而使轨道不再闭合。即势场的 $SO(3)$对称性只能保证轨道在一个平面

内，而不能保证轨道闭合；只有库仑势才能保证有不动的（因而闭合的）椭圆轨道。这表明，库仑势将引进新的守恒量（不变性，即对称性）。显然长轴的方向矢量就是库仑势所引进的附加守恒量，这个矢量称为楞次矢量

$$\boldsymbol{M}=\frac{\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}}{\mu}-\frac{e^2\boldsymbol{r}}{r} \tag{30.9}$$

在图30.1所示的坐标系下，容易写出$\boldsymbol{M}$的直角分量

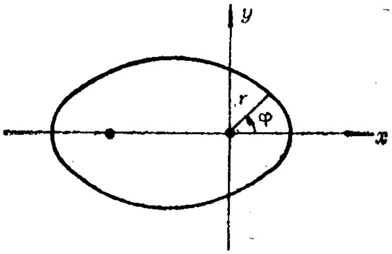


图 30.1

$$\begin{cases} M_x=L\dot{y}-\dfrac{e^2}{r}x=L(\dot{r}\sin\varphi+r\cos\varphi\dot{\varphi})-e^2\cos\varphi \\ M_y=-L\dot{x}-\dfrac{e^2}{r}y=-L(\dot{r}\cos\varphi-r\sin\varphi\dot{\varphi})-e^2\sin\varphi \end{cases}$$

注意 $\dot{r}=\dfrac{dr}{d\varphi}\cdot\dot{\varphi}$，$\dot{\varphi}=\dfrac{L^2}{\mu r^2}$，并利用轨道方程

$$r=\left(\frac{L^2}{\mu e^2}\right)\Big/(1+\varepsilon\cos\varphi)$$

代入后得出（ε为轨道的参数偏心率）

$$\begin{cases} M_x=e^2\varepsilon \\ M_y=0 \end{cases} \tag{30.10}$$

可见$\boldsymbol{M}$确为沿x方向的不变矢量。

将(30.9)量子化，得到相应的厄米算子

$$\hat{M}=\frac{1}{2\mu}(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})-\frac{e^2}{r}\boldsymbol{r} \tag{30.11}$$

容易验证，有如下关系

$$\begin{cases}[\hat{\boldsymbol{M}},\ \hat{H}]=0\\ \hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{M}}=\hat{\boldsymbol{M}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=0\\ \hat{M}^2=\dfrac{2}{\mu}\hat{H}(\hat{L}^2+\hbar^2)+e^4\end{cases} \tag{30.12}$$

这个$\hat{\boldsymbol{M}}$就是（三个分量）独立于$\hat{\boldsymbol{L}}$和$\hat{H}$的新的守恒量。六个算子$\hat{L}_1$、$\hat{L}_2$、$\hat{L}_3$、$\hat{M}_1$、$\hat{M}_2$、$\hat{M}_3$是线性独立的，张成一个六维线性空间。如果六个算子的对易子积仍属于此空间（封闭），我们便得到一个六维李代数；否则还需增加新的独立算子（扩大了空间的维数），直到对易子积在其中封闭为止。六个算子间的15个对易式为

$$[\hat{L}_l,\ \hat{L}_j]=i\hbar\sum_k\varepsilon_{ljk}\hat{L}_k \tag{30.13}$$

$$[\hat{M}_l,\ \hat{L}_j]=i\hbar\sum_k\varepsilon_{ljk}\hat{M}_k \tag{30.14}$$

$$[\hat{M}_l,\ \hat{M}_j]=(i\hbar\sum_k\varepsilon_{ljk}\hat{L}_k)\left(\frac{-2\hat{H}}{\mu}\right) \tag{30.15}$$

由于$\hat{L}_k\hat{H}$一般不能写为前六个算子的线性组合，(30.15)表明，六个算子不构成一个封闭代数。但体系（氢原子中的电子）的整个态矢空间可以分解为$\hat{H}$的所有本征子空间的直和（根据$\hat{H}$的本征函数系的完备性），而每个本征子空间都是$\hat{\boldsymbol{L}}$和$\hat{\boldsymbol{M}}$的不变子空间（这是由于$\hat{\boldsymbol{L}}$和$\hat{\boldsymbol{M}}$都与$\hat{H}$可易），因而$\hat{\boldsymbol{L}}$和$\hat{\boldsymbol{M}}$在整个态矢空间中的行为可用它们在所有本征子空间内的行为来描述。在属于本征值E的本征子空间内$\hat{H}=E$，从而(30.15)退化为

$$[\hat{M}_l,\ \hat{M}_j]=\left(-\frac{2E}{\mu}\right)(i\hbar\sum_k\varepsilon_{ljk}\hat{L}_k) \tag{30.16}$$

可见在每个本征子空间内，六个算子都张成封闭李代数。

令

$$\hat{M}'_l=\sqrt{\mu/2\,|E|}\ \hat{M}_l \tag{30.17}$$

显然$\hat{M}'_l$也是厄米的，有

$$\begin{cases}[\hat{L}_l,\ \hat{L}_j]=i\hbar\sum_k\varepsilon_{ljk}\hat{L}_k\\ [\hat{M}'_l,\ \hat{L}_j]=i\hbar\sum_k\varepsilon_{ljk}\hat{M}'_k\\ [\hat{M}'_l,\ \hat{M}'_j]=\pm i\hbar\sum_k\varepsilon_{ljk}\hat{L}_k\end{cases} \tag{30.18}$$

其中第三式的右边对$E<0$的本征子空间（氢原子的束缚态）取正号，对$E>0$的本征子空间(氢原子的自由态)取负号。若将(30.18)中的各算子遍除以$i\hbar$，便可把式中出现的$i\hbar$去掉。将去掉后$\hbar i$的(30.18)与$SO(4)$生成元的对易式(28.26)以及L_p的生成元的对易式(28.55)相对照，便可看出以上述六个算子($\boldsymbol{L}$，$\boldsymbol{M}$)为生成元的幺正算子群（局部）同构于$SO(4)$（对$E<0$的本征空间）或L_p（对$E>0$的本征空间）。$SO(4)$和L_p以$SO(3)$为公共子群（见28.2节和28.3节）。L_p是非紧的，它没有有限维的幺正表示，而上述与L_p同构的幺正算子群是L_p的一个幺正表示，因而$E>0$的本征子空间必为无限维的（这与在初等量子力学中已熟知的事实相符）。

通常所说的氢原子是指其束缚态。以上的分析表明，氢原子的对称群（准确地说应为能级简并群，因为这个“群”即使对于束缚态的空间也不是封闭的，只是对$\hat{H}$的每个本征子空间才封闭成群）是以$SO(3)$为子群的$SO(4)$。

30.2 对称群与完整力学量组

为了确定量子体系的状态，需要一组可以同时测量（互易）的力学量，它们的共同本征态不再简并（因而是完全确定

的)。这称为体系的一个完整(或完备)力学量组，用来对体系的状态进行分类(以其本征值作为标记状态的量子数)。对给定的体系而言，完整力学量组的选取不是唯一的，最好取为运动积分，因为用它们可将体系的定态进行分类，相应的量子数是“好量子数”。因而对所研究的量子体系，如何寻求一组完整的运动积分，是一项具有基本重要性的工作。这就是要找到彼此互易的最大数目的独立运动积分(其他力学量都是它们的函数)。这个问题也是与体系的对称性密切相关的：体系的对称群将提供一定数量的互易运动积分。

设G是体系的对称(实)李群，它在态矢空间中表现为一个幺正算子群$G=\{\hat{g}\}$，$\hat{g}^{-1}=\hat{g}^{+}$，则G的无穷小算子都是作用于态矢空间上与$\hat{H}$对易的反厄米算子。所以，G的无穷小算子乘以$i=\sqrt{-1}$后都可视为体系的运动积分。现在需要由它们生成互易的运动积分。若G的秩为l，则有l个互易的无穷小生成元，它们是G的李代数之嘉当子代数的一组基，乘i后记为$\{\hat{H}_1, \hat{H}_2, \cdots, \hat{H}_l\}$。这些$\hat{H}_l$都是互易厄米算子，它们实际上是$G$的复扩充的嘉当子代数$\mathscr{L}_C$的基。取$\mathscr{L}_C$的标准基$\{\hat{H}_i, \hat{E}_\alpha\}$，可按(27.10)作出卡塞米尔算子$\hat{C}=g^{ij}\hat{H}_i\hat{H}_j+\sum_\alpha \hat{E}_\alpha\hat{E}_{-\alpha}$。如果$G$是紧致的，则按(24.104)，$(\hat{E}_\alpha-\hat{E}_{-\alpha})$和$i(\hat{E}_\alpha+\hat{E}_{-\alpha})$都是$G$的无穷小算子(其李代数$\mathscr{L}$的基)，因而都是反厄米的，这要求

$$\hat{E}_\alpha^{+}=\hat{E}_{-\alpha} \tag{30.19}$$

从而知$\hat{C}$也是厄米的

$$\hat{C}^{+}=\hat{C} \tag{30.20}$$

所以，一个对称紧致李群至少可以提供$(l+1)$个互易运动积分

$$\{\hat{H}_1, \hat{H}_2, \cdots \hat{H}_l, \hat{C}\} \tag{30.21}$$

实际上除了$\hat{C}$之外还存在$(l-1)$个与(30.21)对易且彼此互易的独立算子（见27.1节），其中满足自厄条件或经适当组合后能满足自厄条件的均可加入体系的完整力学量组的行列。

例如，处于有心外场中的体系具有空间转动对称性$SO(3)$，$SO(3)$的秩为1，从而有互易运动积分$\hat{H}_1$和$\hat{C}$. 由25.1节中的讨论可知

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{J}_3$$

$$\hat{C} = \frac{1}{2}\hat{J}^2$$

（$\hat{J}$由(22.1)定义，满足(21.9)等对易关系。）这就是熟知的总角动量。时间平移对称群(见(30.8)）提供的运动积分就是哈密顿算子$(-\hat{H}/\hbar)$。因而体系的完整力学量组总可写为

$$\{\hat{H}, \hat{J}^2, \hat{J}_3, \cdots\}$$

若对称群G为有限群，则有r（类个数）个类算子$\{\hat{K}_1, \hat{K}_2, \cdots, \hat{K}_r\}$，它们彼此互易且与哈密顿$\hat{H}$可易（见§16)。因$G$是有限的，故总可看作是态矢空间上的幺正算子群，但一般不是厄米的，因而类算子(16.3)一般也不是厄米的。但作为力学量，算子必须是厄米的；为了得到互易运动积分，需由类算子生成厄米算子。为此，再对类算子的性质作一点讨论。

由共厄元的定义(9.5)容易看出，两个相互共厄的元其逆也是相互共厄的。所以，一个类中的所有群元的逆也成一个类。这样的两个类通常也称为是互逆的；一个类如果与它的逆类重合，则称为自逆的。由此，群G的类总可分为两部分：一

部分是自逆类；另一部分是非自逆类，它们必定以两两互逆的形式成对出现（因而数目为偶数）。若类K'是类 K 的逆，则有

$$\hat{K}'=\sum_{g\in k}\hat{g}^{-1}=\sum_{g\in k}\hat{g}^{+}=(\sum_{g\in k}\hat{g})^{+}=\hat{K}^{+} \qquad (30.22)$$

即：互逆类的算子是相互共厄的。特别地，自逆类的算子是自厄（厄米）的

$$\hat{K}^{+}=\hat{K} \qquad 当\hat{K}'=\hat{K} \qquad (30.23)$$

由(30.22)可知，每对互逆类的算子可组合出两个厄米算子

$$\hat{K}+\hat{K}' \qquad 和 \qquad i(\hat{K}-\hat{K}') \qquad (30.24)$$

总之，设G的自逆类为K_{01}，K_{02}，…，K_{0n}，非自逆类为K_1，K_1'，K_2，K_2'，…，K_m，$K_m'(n+2m=r)$，则对称性群G至少为体系提供r个互易运动积分

$$\{\hat{K}_{01},\ \cdots,\ \hat{K}_{0n};\ (\hat{K}_1+\hat{K}_1'),\ i(\hat{K}_1-\hat{K}_1'),\ \cdots,\ (\hat{K}_m+\hat{K}_m'),\ i(\hat{K}_m-\hat{K}_m')\} \qquad (30.25)$$

其中$\hat{K}_{01}=\hat{I}$是恒等算子($K_{01}=\{I\}$)，可以去掉。

例如，由空间反演 i 生成的二元群 $C_i=\{I,\ i\}$的两个类$\{I\}$和$\{i\}$都是自逆的；$\{i\}$的算子$\hat{i}$是自厄的，它便是宇称。具有C_i对称性的体系的$\hat{i}$是运动积分。

群 $C_{3v}=\{I,C_3,C_3^2,\ \sigma_v^{(1)},\ \sigma_v^{(2)},\ \sigma_v^{(3)}\}$的三个类也都是自逆的，对有 C_{3v} 对称性的体系给出两个互易运动积分：$\hat{K}_{02}=\hat{C}_3+\hat{C}_3^2$，$\hat{K}_{03}=\hat{\sigma}_v^{(1)}+\hat{\sigma}_v^{(2)}+\hat{\sigma}_v^{(3)}$。群$T=\{I,4C_3,\ 4C_3^2,\ 3C_2\}$的四个类有两个自逆的：$K_{01}=\{I\}$，$K_{02}=\{3C_2\}$；其余两个互逆：$\hat{K}_1=\{4C_3\}$，$\hat{K}_1'=\{4C_3^2\}$。因而它对$T$对称系统提供3

个互易运动积分$\hat{K}_{02}$,$(\hat{K}_1+\hat{K}_1^\dagger)$和$i(\hat{K}_1-\hat{K}_1^\dagger)$。

§31 对称性与简并

31.1 对称简并与偶然简并

我们已经知道，体系的能量本征子空间$\mathscr{V}_E$在体系对称群$G=\{\hat{g}\}$下是不变的($\psi\in\mathscr{V}_E$，即$\hat{H}\psi=E\psi\Rightarrow\hat{H}(\hat{g}\psi)=\hat{g}\hat{H}\psi=E(\hat{g}\psi)$，亦即$\hat{g}\psi\in\mathscr{V}_E$)，因而是$G$的一个表示空间。这个表示一般是可约的，设第$i$个不可约成分$A^{(i)}$在其中出现的次数为$a_i$，$A^{(i)}$的维数为$n_i$，则$\mathscr{V}_E$的维数可写为

$$f_E=\sum_i a_i n_i \tag{31.1}$$

这显然是能级E的简并度。所以，能级的简并度是体系对称性的一种表现。问题的实质在于，凡是与$\hat{H}$对易的算子$\hat{g}$都使$\mathscr{V}_E$不变，只要这个算子在$\mathscr{V}_E$上不等于单位算子的倍数，便意味着简并（至少有一个$\psi\in\mathscr{V}_E$，使$\hat{g}\psi$与ψ线性无关）；反之，使$\mathscr{V}_E$不变（对所有E）的算子必与$\hat{H}$对易（写出能量表象中的矩阵形式即可见），因而是体系的一个对称变换。所以，体系$\hat{H}$的对称性与能级的简并，这两个不同的概念实际上是密切相关的，也可以说后者是前者的一种物理效应。

通常说的对称群G不一定是体系的完全（最大）对称群G_m，一般G只是G_m的一个子群。设$\hat{h}$是不含于G的一个对称变换，则$\mathscr{V}_E$在$\hat{h}$下也是不变的；但$\mathscr{V}_E$的每个(关于G的)不可约子空间(只对$\hat{g}\in G$不变)在$\hat{h}$下不一定不变，$\hat{h}$可能将一个不可约子空间的矢量变为另一个子空间（或在其中有非零分量）的矢量。因而，随着对称群的扩充，原来的几个不可约子空间将合并为一个不可约子空间。可以设想，当G扩充为完全对称群G_m（不能再扩充了）时，$\mathscr{V}_E$将合并为一个不可约空间。由于实际上人们无法断言所达到的对称群是否已经是体系的完全对

称群，上述设想只是一个没有证明的命题。有些作者将它称为“不可约性假设”。这条假设可以更明确地表述为：量子体系的能量($\hat{H}$)的本征子空间是体系($\hat{H}$)的完全对称群 G_m 的不可约表示空间；或，简并的定态波函数按完全对称群的不可约表示变换。按此假设，当我们发现简并的波函数按对称群G的可约表示变换时，就说明G是不完全的，体系还存在尚未被发现的对称变换。

以氢原子为例，已知 $G=SO(3)$是它的一个对称群（不计自旋）。考虑能级E_n的本征子空间$\mathscr{V}_n$，它由本征函数 $\{\psi_{nlm}=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$；$l=0,1,2,\cdots,n-1$，$m=-l,(-l+1),\cdots,l\}$张成，球函数$\{Y_{lm}\}$按$SO(3)$的不可约表示 $D^{(l)}$变换，张成不可约子空间$\mathscr{V}_{nl}$。可写

$$\begin{cases}\mathscr{V}_n=\mathscr{V}_{n,0}\oplus\mathscr{V}_{n,1}\oplus\cdots\oplus\mathscr{V}_{n,n-1}\\ f_n=1+3+\cdots+2(n-1)+1=n^2\end{cases} \tag{31.2}$$

$\mathscr{V}_n$的可约性表明氢原子还存在除$SO(3)$之外的对称性。在上节中已找到了新的对称变换$\hat{\boldsymbol{M}}$，从而将$SO(3)$扩充为$SO(4)$。现在本征子空间$\mathscr{V}_n$当然是$SO(4)$的一个表示空间，可以看出，这个表示是不可约的。将上节中对氢原子的讨论与28.2节中关于$SO(4)$的表示的讨论相对照，不难看出，氢原子的算子$\hat{\boldsymbol{L}}$和$\hat{\boldsymbol{M}}'$与(28.25)中的$\boldsymbol{I}$和$\boldsymbol{K}$相当，即

$$\hat{\boldsymbol{L}}=i\hbar\hat{\boldsymbol{I}}\quad,\quad\hat{\boldsymbol{M}}'=i\hbar\hat{\boldsymbol{K}} \tag{31.3}$$

所以$SO(4)$的不变算子(28.42)和(28.43)可写为

$$\hat{F}_1=-\frac{1}{8}(\hat{\boldsymbol{I}}+\hat{\boldsymbol{K}})^2=\frac{1}{8\hbar^2}(\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{M}}')^2=\frac{1}{8\hbar^2}(\hat{\boldsymbol{L}}^2+\hat{\boldsymbol{M}}'^2)$$

$$\hat{F}_2 = -\frac{1}{8}(\hat{\boldsymbol{I}} - \hat{\boldsymbol{K}})^2 = \frac{1}{8\hbar^2}(\hat{\boldsymbol{L}} - \boldsymbol{M}')^2 = \frac{1}{8\hbar^2}(\hat{L}^2 + \hat{M}'^2) \tag{31.4}$$

其中已用到(30.12)的第二式。曾在 28.2 节中指出，这两个不变算子的共同本征子空间便是 2 秩李群$SO(4)$的不可约表示空间。将它们作用于$\mathscr{V}_E$，注意$\hat{H}=E$,并利用(30.17)和(30.12)的第三式，可得

$$\hat{F}_1 = \hat{F}_2 = -\frac{1}{8}\left(1 + \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 E}\right)$$

这表明$\mathscr{V}_E$是$\hat{F}_1$和$\hat{F}_2$的共同本征子空间，按$SO(4)$的不可约表示 $D^{(j_1,j_2)}$变换。而$j_1=j_2=j$ 由下方程确定（见(28.44)）

$$\frac{1}{2}j(j+1) = -\frac{1}{8}\left(1 + \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 E}\right) \tag{31.5}$$

这就证明了$\mathscr{V}_E$对于$SO(4)$是不可约的。或令

$$n = 2j + 1$$

$(n=1,2,\cdots)$,可解出

$$E = -\mu e^4/(2\hbar^2 n^2) \tag{31.6}$$

这便是氢原子能级的波尔公式， n 即主量子数。现在可以说，能级 E_n 的简并波函数按$SO(4)$ 的不可约表示 $D^{\left(\frac{n-1}{2},\frac{n-1}{2}\right)}$变换，简并度即这个表示的维数，由(28.36)有

$$f_n = (2j+1)^2 = n^2 \tag{31.7}$$

由 (31.2) 可见，当将$SO(4)$的表示 $D^{\left(\frac{n-1}{2},\frac{n-1}{2}\right)}$看作其子群$SO(3)$的表示时，它是可约的，并有约化公式

$$D^{\left(\frac{n-1}{2},\frac{n-1}{2}\right)}\Big|_{SO(3)}=D^{(0)}\oplus D^{(1)}\oplus\cdots\oplus D^{(n-1)}$$
(31.8)

上式也可由$SO(4)$的不可约表示公式（28.35）或特征标公式（28.37）得出，只须令其中的$j_1=j_2=j=\frac{n-1}{2}$，并注意在$SO(4)$的群参数中令$\boldsymbol{b}=0$，即$\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\alpha}$，便退化为子群$SO(3)$（见(28.24)和(28.32)）。

在上面的例子中，库仑场的$SO(4)$对称性决定了氢原子能级E_n的$D^{\left(\frac{n-1}{2},\frac{n-1}{2}\right)}$简并($n^2$度)。不破坏这一对称性，怎样改变系统参量都不能消除这种简并。如果用一般的有心力场来取代库仑场，则$SO(4)$对称性将被部分破坏，因$\hat{\boldsymbol{M}}$一般不再是对称变换。从而体系的对称群由$SO(4)$退化为子群$SO(3)$。与此相应，能级的$D^{\left(\frac{n-1}{2},\frac{n-1}{2}\right)}$简并也将被部分消除（按(31.8)分裂），新的能级E_{nl}具有$D^{(l)}$($SO(3)$的不可约表示）简并（$(2l+1)$度）。同样地，只要不破坏$SO(3)$对称，不管怎样改变有心力场的函数形式，都不能消除$D^{(l)}$简并。一般地，可以说与对称群G相联系的对称简并是由G的不可约表示来体现的，相应的简并度等于不可约表示的维数。对氢原子的情形，与$SO(3)$对称相联系的简并只是$D^{(l)}$，而不是$D^{\left(\frac{n-1}{2},\frac{n-1}{2}\right)}$，后者是与$SO(4)$对称相联系的。随着对称性的下降（破缺），原对称群将被其某一子群所取代，因而原来的每个本征子空间(原群的既约表示空间）将分解为几个新的本征子空间（子群的既约表示空间）的直和。所以，使体系的对称性下降（部分破坏）的微扰一般将导致能级的分裂和简并度的降低。

除了上述由体系的对称性所引起的对称简并之外，还存在一种与对称性无关的“偶然简并”。我们知道，体系的能级是

体系本身以及外场的某些参数的函数，能级将随这些参数的改变而变化。以 x 表示所说的参数，考虑两个相邻的能级 $E_1(x) < E_2(x)$，可能出现下述情形：随着 x 的增大，$E_1(x)$ 上升而 $E_2(x)$ 下降；当 x 增至 x_0 时恰有 $E_1(x_0)=E_2(x_0)$；$x>x_0$ 时，E_1 和 E_2 又分开来。这样在参数 x 的特殊值 x_0 处便出现了与对称性无关的附加简并性。这就是偶然简并。偶然简并是不能用对称分析的方法来处理的。

31.2 时间反演简并

时间反演简并也是一种对称简并。但时间反演算子与空间反演算子不同，它不是线性算子，因而这种对称性的物理效应也与一般可用线性算子表达的对称性有所不同，例如它没有相应的守恒定律和运动积分。时间反演对称性仍具有简并效应，由于上述原因，对这种简并效应需作特殊分析。

(1) 时间反演态与时间反演算子

在经典力学中，一个粒子的状态是用其坐标和动量 $(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ 来描写的。对时间反演变换，$\boldsymbol{r}$ 不变，而 $\boldsymbol{p}\propto\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}$ 变为 $-\boldsymbol{p}$，因而状态 $(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 的时间反演态是 $(\boldsymbol{r},-\boldsymbol{p})$。在非相对论量子力学中，单粒子的状态用波函数 $\psi=\psi(\boldsymbol{r}, s_z)$ 来描写，这时应如何定义态 ψ 的时间反演态 ψ_T 呢？由经典类比，对状态 ψ_T 和 ψ，力学量 $\boldsymbol{r}$ 的平均值应相等，力学量 $\boldsymbol{p}$ 的平均值应差一符号，力学量 $\boldsymbol{s}$（与 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 类似）的平均值也应差一符号。特别地，如 ψ 是 $\boldsymbol{r}$、$\boldsymbol{p}$ 或 $\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{n}$ 中某一量有确定值的状态，则 ψ_T 也应是这样的态，且所属的本征值对 $\boldsymbol{r}$ 是相同的，对 $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{n}$ 则差一符号，即有

$$\hat{\boldsymbol{r}}\psi=\boldsymbol{r}\psi \longrightarrow \hat{\boldsymbol{r}}\psi_T=\boldsymbol{r}\psi_T$$

$$\hat{\boldsymbol{p}}\psi=\boldsymbol{p}\psi \longrightarrow \hat{\boldsymbol{p}}\psi_T=-\boldsymbol{p}\psi_T$$

$$\hat{s}\cdot n\psi = s_n\psi \longrightarrow \hat{s}\cdot n\psi_T = -s_n\psi_T$$

如以$\hat{T}$表时间反演算子

$$\psi_T = \hat{T}\psi \tag{31.9}$$

上述条件可表为关于时间反演算子的性质（注意n为任意单位矢量）

$$\hat{T}\hat{r} = \hat{r}\hat{T} \tag{31.10}$$

$$\hat{T}\hat{p} = -\hat{p}\hat{T} \tag{31.11}$$

$$\hat{T}\hat{s} = -\hat{s}\hat{T} \tag{31.12}$$

此外，经两次时间反演后应变回原态，即$\hat{T}^2\psi$与ψ应为同一状态，因而这两个波函数只能差一常因子：$\hat{T}^2\psi = c\psi$。此即

$$\hat{T}^2 = c \tag{31.13}$$

按波函数的物理意义，显然还应有

$$(\psi_T, \ \psi_T) = (\hat{T}\psi, \hat{T}\psi) = (\psi, \ \psi) \tag{31.14}$$

（上式蕴含(31.13)中的$|c|^2 = 1$，下面将表明，还应有进一步的要求：$c^2 = 1$）。

以上诸式(31.9)——(31.14)便是量子力学中时间反演态（或时间反演算子）的定义所应满足的条件。

满足上述诸条件的算子$\hat{T}$不可能是线性的，因而这里需对线性算子的概念进行一点儿扩充。注意式(31.14)，此式应对态矢空间中的所有ψ成立，因而要求：如果它对ψ_1和ψ_2成立，也须对$(\psi_1+\psi_2)$成立；如对ψ成立，也须对$c\psi$成立（c是任一常数）。当$\hat{T}$为线性算子，显然满足这两点要求。现在

我们仍保留$\hat{T}$的一部分线性性质：$\hat{T}(\psi_1+\psi_2)=\hat{T}\psi_1+\hat{T}\psi_2$，同时注意上面的第二点要求除了可由条件$\hat{T}(c\psi)=c\hat{T}\psi$满足之外，还可由条件$\hat{T}(c\psi)=c^*\hat{T}\psi$满足。由此可知，除了线性算子外，与条件（31.14）相容的，还有“反线性”算子

$$\hat{T}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1^*\hat{T}\psi_1+c_2^*\hat{T}\psi_2 \qquad (31.15)$$

对于线性算子，由它不改变矢量的长度（即式(31.14)），便可推知它也不改变任二矢量的内积。即：满足条件（13.14）的线性算子是幺正的。对于反线性算子(31.15)，用类似的方法易推证，若它不改变任意矢量之长度，则也不改变任二矢量内积的绝对值，事实上它将任二矢量的内积变为其共轭复数。这样的算子称为是“反幺正”的。所以，满足条件（13.14）的反线性算子必为反幺正的。从而有

$$(\hat{T}\psi,\ \hat{T}\varphi)=(\varphi,\ \psi)=(\psi,\ \varphi)^* \qquad (31.16)$$

下面将会看到，反幺正算子与条件（31.9）—（31.14）是相容的。

由(31.16)可以证明，(31.13)中的常数c只能取±1。由(31.16)可得

$$(\hat{T}\psi,\ \varphi)=(\hat{T}\varphi,\ \hat{T}^2\psi)=c(\hat{T}\varphi,\ \psi)$$

$$(\hat{T}\varphi,\ \psi)=(\hat{T}\psi,\ \hat{T}^2\varphi)=c(\hat{T}\psi,\ \varphi)$$

将第二式代入第一式，得

$$(\hat{T}\psi,\ \varphi)=c^2(\hat{T}\psi,\ \varphi)$$

所以，$c^2=1$。即

$$\hat{T}^2=\pm1 \qquad (31.17)$$

反幺正算子的一个简单的例子是复共轭算子$\hat{K}$

$$\hat{K}\psi=\psi^* \tag{31.18}$$

显然满足

$$\hat{K}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1^*\hat{K}\psi_1+c_2^*\hat{K}\psi_2 \tag{31.19}$$

$$(\hat{K}\psi,\ \hat{K}\varphi)=(\psi,\ \varphi)^*=(\varphi,\ \psi) \tag{31.20}$$

$$\hat{K}^2=1 \tag{31.21}$$

任意两个反幺正算子的乘积一定是幺正算子。所以$\hat{T}\hat{K}=\hat{U}_T$是幺正的。将此式右乘$\hat{K}$，并注意(31.21)，可得

$$\hat{T}=\hat{U}_T\hat{K} \tag{31.22}$$

这可以看作是反幺正算子的一般形状：幺正算子与复共轭算子之积。将(31.22)代入(31.10)——(31.13)及(31.17)，便可得到幺正算子$\hat{U}_T$所须满足的条件

$$\hat{U}_T\hat{\boldsymbol{r}}=\hat{\boldsymbol{r}}\hat{U}_T \tag{31.23}$$

$$\hat{U}_T\hat{\boldsymbol{p}}=\hat{\boldsymbol{p}}\hat{U}_T \tag{31.24}$$

$$\begin{cases}\hat{U}_T\hat{s}_x=-\hat{s}_x\hat{U}_T\\ \hat{U}_T\hat{s}_y=\hat{s}_y\hat{U}_T\\ \hat{U}_T\hat{s}_z=-\hat{s}_z\hat{U}_T\end{cases} \tag{31.25}$$

$$\tilde{\hat{U}}_T=\pm\hat{U}_T \tag{31.26}$$

其中已注意到：对任意算子$\hat{F}$，有$\hat{K}\hat{F}=\hat{F}^*\hat{K}$；在$\boldsymbol{r}$表象中，$\hat{\boldsymbol{r}}$是实的，而$\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\nabla$是纯虚的；在$\hat{s}_z$为对角形的表象中，由(21.21)式确定的$\hat{s}_+$和$\hat{s}_-$的矩阵都是实的，因而$\hat{s}_x=\frac{1}{2}(\hat{s}_++\hat{s}_-)$是实的，$\hat{s}_y=\frac{1}{2i}(\hat{s}_+-\hat{s}_-)$是纯虚的。

下面我们利用(31.23)——(31.26)来确定算子$\hat{U}_T$的具体形式，从而确定算子$\hat{T}$的形式。条件(31.23)和(31.24)要求$\hat{U}_T$对$\psi(\boldsymbol{r},s_z)$中的变量$\boldsymbol{r}$无作用而只作用于变量s_z。取$(\boldsymbol{r},s_z)$表象的基矢$|\boldsymbol{r},s_z\rangle$，由(31.23)知$\hat{U}_T|\boldsymbol{r},s_z\rangle$仍是$\hat{\boldsymbol{r}}$的属于本征值$\boldsymbol{r}$的本征矢，所以在$\hat{U}_T|\boldsymbol{r},s_z\rangle$的展开式中不可能含有其他$\boldsymbol{r}$值的基矢（$\boldsymbol{r}$值不同的基矢是正交的）

$$\hat{U}_T|\boldsymbol{r},s_z\rangle=\sum_{s_z'}U_{T\,s_z's_z}(\boldsymbol{r})\,|\boldsymbol{r},s_z'\rangle$$

又由(31.24)，上式中的函数$U(\boldsymbol{r})$必须与$\boldsymbol{P}$可易，从而$\nabla U(\boldsymbol{r})=0$，即$U(\boldsymbol{r})=$常数。所以在$(\boldsymbol{r},s_z)$表象中，$\hat{U}_T$是与$\boldsymbol{r}$无关的常数矩阵，作用于变量$s_z$。换言之，$\hat{U}_T$是作用在自旋函数空间上的幺正算子（矩阵）。设粒子的总自旋量子数为s，则其自旋函数空间按$SO(3)$群的不可约表示$D^{(s)}(\boldsymbol{\alpha})$变换（见22.2节），写成算子的形式便是

$$\hat{D}^{(s)}(\boldsymbol{\alpha})=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\boldsymbol{s}}\cdot\boldsymbol{\alpha}}\tag{31.27}$$

此即(22.1)式，但$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{S}}$，并加入了曾被略去的常数$\hbar$（不再取$\hbar=1$）。由此可看出，式(31.25)几乎完全确定了算子$\hat{U}_T$。假如自旋函数空间上的幺正算子$\hat{A}$也满足(31.25)，则算子$\hat{A}\hat{U}_T^{-1}$显然与$\hat{\boldsymbol{S}}$可易，因而$\hat{A}\hat{U}_T^{-1}$也与$\hat{D}^{(s)}(\boldsymbol{\alpha})$可易。按Schur引理，必有$\hat{A}\hat{U}_T^{-1}=c$。$\hat{A}$的幺正性要求$|c|=1$。总之有

$$\hat{A}=e^{i\lambda}\hat{U}_T\tag{31.28}$$

λ是实常数。由以下的考虑不难找出(31.25)的一个解。后面还将表明，$\hat{\boldsymbol{S}}$是$SO(3)$的一阶不可约张量（即矢量）算子，即有变换性质

$$\hat{D}^{(s)}(\boldsymbol{\alpha})\hat{\boldsymbol{s}}\hat{D}^{(s)}(\boldsymbol{\alpha})^{-1}=g(\boldsymbol{\alpha})\hat{\boldsymbol{s}}\tag{31.29}$$

$g(\boldsymbol{\alpha})$是三维空间中的转动操作（$SO(3)$的元）。如取$g(\boldsymbol{\alpha})$为绕y轴转π角的转动(即取$\boldsymbol{\alpha}=\pi\boldsymbol{y}_0$，则它将使$\hat{s}_x$和$\hat{s}_z$变号而$\hat{s}_y$

不变。这时(31.29)化为（将$\alpha=\pi y_0$代入(31.27)和(31.29)）

$$
\begin{aligned}
e^{-\frac{i}{\hbar}\pi\hat{s}_y}\hat{s}_x e^{\frac{i}{\hbar}\pi\hat{s}_y} &= -\hat{s}_x \\
e^{-\frac{i}{\hbar}\pi\hat{s}_y}\hat{s}_y e^{\frac{i}{\hbar}\pi\hat{s}_y} &= \hat{s}_y \\
e^{-\frac{i}{\hbar}\pi\hat{s}_y}\hat{s}_z e^{\frac{i}{\hbar}\pi\hat{s}_y} &= -\hat{s}_z
\end{aligned}
\tag{31.30}
$$

与(31.25)对比，便可看出幺正算子$e^{-i\frac{\pi}{\hbar}\hat{s}_y}$是一个解。按(31.28)，(31.25)的一般解为

$$\hat{U}_T=e^{i\lambda}\cdot e^{-i\pi\hat{s}_y/\hbar} \tag{31.31}$$

注意条件(31.26)对相因子$e^{i\lambda}$无限制，可简单地取$e^{i\lambda}=1$（$\lambda=0$）。最后得

$$\hat{U}_T=e^{-i\pi\hat{s}_y/\hbar} \tag{31.32}$$

必须验证一下(31.32)是否满足条件(31.26)，如果满足，就说明$\hat{T}=\hat{U}_T\hat{K}$符合时间反演算子的全部条件，并说明反幺正性与那些条件是相容的而幺正性则不能与那些条件相容（无幺正解）；如果不满足(31.26)，则说明反幺正算子也不能充当时间反演算子。由(21.21)可见，$\tilde{\hat{s}}_+=\hat{s}_-,\tilde{\hat{s}}_-=\hat{s}_+$，所以

$$\tilde{\hat{s}}_y=-\hat{s}_y$$

从而有

$$\tilde{\hat{U}}_T=e^{-i\pi\tilde{\hat{s}}_y/\hbar}=e^{i\pi\hat{s}_y/\hbar}=e^{2\pi i\hat{s}_y/\hbar}\cdot e^{-i\pi\hat{s}_y/\hbar}$$

但由21.3节的讨论可知

$$e^{2\pi i\hat{s}_y/\hbar}=\hat{D}^{(s)}(2\pi y_0)=(-1)^{2s} \tag{31.33}$$

所以有

$$\tilde{\hat{U}}_T=(-1)^{2s}\hat{U}_T \tag{31.34}$$

说明(31.32)满足条件(31.26)。

由(31.32)我们得到单粒子体系的时间反演算子

$$\hat{T}=e^{-i\pi\hat{s}_y/\hbar}\cdot\hat{K} \tag{31.35}$$

(31.34)又表明

$$\hat{T}^2=\begin{cases}1 & \text{对于玻色子}\\ -1 & \text{对于费米子}\end{cases} \tag{31.36}$$

对于无自旋($s=0$)的粒子，$\hat{\boldsymbol{s}}=0$

$$\hat{T}=\hat{K} \tag{31.37}$$

时间反演算子就是复共轭算子。对于自旋为1/2($s=1/2$) 的粒子，

$$\hat{s}_y=\hat{\sigma}_y\cdot\hbar/2, \text{而} e^{-i\pi\hat{s}_y/\hbar}=e^{-i\pi\hat{\sigma}_y/2}=-i\hat{\sigma}_y$$

（由(7.7)和(7.8)式），所以

$$\hat{T}=-i\hat{\sigma}_y\hat{K} \tag{31.38}$$

对于多粒子（n个）体系，要求条件(31.23)、(31.24)、(31.25) 对每个单粒子的算子都成立，因而应有（注意不同粒子的算子是互易的）

$$\hat{U}_T=e^{-i\pi\hat{s}_{1y}/\hbar}e^{-i\pi\hat{s}_{2y}/\hbar}\cdots e^{-i\pi\hat{s}_{ny}/\hbar} \tag{31.39}$$

代入(31.22)得出T算子

$$\hat{T}=e^{-i\pi\hat{s}_{1y}/\hbar}e^{-i\pi\hat{s}_{2y}/\hbar}\cdots e^{-i\pi\hat{s}_{ny}/\hbar}\hat{K} \tag{31.40}$$

并有

$$\hat{T}^2=(-1)^{\sum_{i=1}^{n}2s_i}=(-1)^{n'}=\begin{cases}1, n'=\text{偶数}\\ -1, n'=\text{奇数}\end{cases} \tag{31.41}$$

其中n'为体系中的费米子数。

(2) 时间反演对称性

时间反演对称性或时间反演不变性，在物理上是指体系在

给定条件下的运动的可逆性。也就是说，在给定的物理条件下，若体系从任意初态ψ_1（或$(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{p}_1)$）经某一过程达到终态$\psi_2$（或$(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{p}_2)$），则反过来从终态的时间反演态$\hat{T}\psi_2$(或$(\boldsymbol{r}_2,-\boldsymbol{p}_2)$）出发，体系必以相反的时间顺序经历正过程中各态的时间反演态而达到初态的时间反演态$\hat{T}\psi_1$（或$(\boldsymbol{r}_1,-\boldsymbol{p}_1)$）。我们知道，在经典力学中体系的运动是否可逆，是由相互作用（力）的性质决定的。在量子力学中也是如此。因而时间反演对称性在本质上也是相互作用的一种性质。所以，体系具有时间反演对称性的条件应该以时间反演算子与哈密顿算子的关系来表现。

体系状态随时间变化的规律由运动方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=\hat{H}\psi(t) \tag{31.42}$$

规定。也可用上方程的形式解写出态的发展规律

$$\psi(t)=e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(0) \tag{31.43}$$

如果有时间反演对称性，则由态$\psi(t)$的反演态$\psi_T(t)=\hat{T}\psi(t)$出发，经时间t后体系将返回初态$\psi(0)$的反演态$\psi_T(0)=\hat{T}\psi(0)$。利用(31.43)，这可写为

$$\psi_T(0)=e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(t) \tag{31.44}$$

将(31.43)代入上式，可得

$$\hat{T}\psi(0)=e^{-i\hat{H}t/\hbar}\hat{T}e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi_T(0)$$

或

$$e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{T}=\hat{T}e^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{31.45}$$

注意到上式对任意实数t成立，又可等价地写为

$$(i\hat{H}/\hbar)\hat{T}=\hat{T}(-i\hat{H}/\hbar)$$

又由$\hat{T}$的反线性性，有

$$\hat{T}\hat{H}=\hat{H}\hat{T} \tag{31.46}$$

这便是体系具有时间反演对称性的充要条件（由(31.46）也可逆推回去）。这一点在形式上与其他对称性是一样的（相应的算子与$\hat{H}$可易）。条件(31.46)也可用反演态所满足的运动方程来表达。以$\hat{T}$作用(31.42)并以(31.46)代入，便得($\hat{T}$的反线性性和t的实性保证了$\hat{T}$与$\frac{\partial}{\partial t}$可易）

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_T(t)=\hat{H}\psi_T(t) \tag{31.47}$$

或

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_T(-t)=\hat{H}\psi_T(-t) \tag{31.48}$$

(31.44)——(31.48)是彼此等价的，表达了时间反演不变性的不同形式。条件(31.46)也可用幺正算子$\hat{U}_T$给出

$$\hat{U}_T\hat{H}^*=\hat{H}\hat{U}_T \quad 或\hat{U}_T\hat{H}^*\hat{U}_T^+=\hat{H} \tag{31.49}$$

对于无自旋粒子，$\hat{U}_T=1$，(31.49)成为

$$\hat{H}^*=\hat{H} \tag{31.50}$$

即哈密顿算子为实的。当存在外磁场时，$\hat{H}$中含有与$\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\nabla$成比例的项（系数是实的），不满足(31.50)，因而不具有时间反演对称性（经典力学的情形亦如此）。对自旋为1/2的粒子，$\hat{U}_T=-i\hat{\sigma}_y$，(31.49)成为

$$\hat{\sigma}_y\hat{H}^*\hat{\sigma}_y=\hat{H} \tag{31.51}$$

这时$\hat{H}$中只要含有正比于（实系数）$\hat{\boldsymbol{p}}$、$\hat{\boldsymbol{s}}$的项（例如存在外磁场时），就不具有时间反演对称性。

任意个电子的体系，当无外磁场时，都具有时间反演对称性。体系的内磁场不会破坏这种对称性，因为在作$\hat{T}$反演时，作为内场场源的粒子的速度（电流）都反转了，因而内磁场的

方向也就转了，于是 $\hat{H}$ 中与磁场有关的项（例如 $\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\boldsymbol{H}$、$\hat{\boldsymbol{s}}\cdot\boldsymbol{H}$ 等）都不变。但外磁场不同，$\hat{T}$ 反演只作用于体系自身，而不作用于外场，在作$\hat{T}$反演时外场不变。所以外磁场的存在必破坏电子体系的$\hat{T}$反演对称性。

(3) 时间反演对称性带来的附加简并

设 ψ 是一个定态，如体系具有 $\hat{T}$反演对称性，则由(31.46)可知$\hat{T}\psi$是属于同一个能级的定态。当 $\hat{T}^2=-1$时，$(\hat{T}\psi,\psi)=(\hat{T}\psi,\hat{T}^2\psi)=-(\hat{T}\psi,\psi)\Rightarrow(\hat{T}\psi,\psi)=0$，$\hat{T}\psi$ 与 ψ 正交，因而是线性独立的。可见，此时至少有二度简并。由此推知：奇数个电子的体系，当不存在外磁场时，其每个能级的简并度都是偶数。此即Kramers 定理。但即使 $\hat{T}\psi$ 与 ψ 是两个独立的态，我们仍不能肯定一定有 $\hat{T}$反演的附加简并，因为它可能已经包含在其他的对称简并当中。例如，由对称群G所形成的简并由它的不可约子空间的维数决定，设一个不可约子空间为$\mathscr{V}$，则可能存在两种情形：若对 $\psi\in\mathscr{V}$总有 $\hat{T}\psi\in\mathscr{V}$，则 $\hat{T}$ 简并已含于G简并当中，$\hat{T}$ 对称并未引起新的简并效应；若有 $\psi\in\mathscr{V}$ 使 $\hat{T}\psi\notin\mathscr{V}$，则 $\hat{T}$ 对称将引起在G简并之外的附加简并。如果我们已经知道了G简并，在前一情形下就无需再考虑$\hat{T}$简并，在后一情形下则必须考虑$\hat{T}$简并。下面我们来进一步分析对称产生附加简并的条件（判据）。

为确定起见，我们考虑一个 n 个电子的体系，并假定时间反演对称性存在（无外磁场）。设体系的对称群为G，而G的算子与$\hat{T}$互易（常见的情形是G为$SO(3)$或有限点群——$SO(3)$的子群，这时G的算子为 $\hat{g}=e^{-i\hat{\boldsymbol{J}}\cdot\boldsymbol{\alpha}/\hbar}$，注意 $\hat{\boldsymbol{J}}$ 是各电子的轨道角动量$\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}$和自旋角动量$\hat{\boldsymbol{s}}$之和，及(31.10)、(31.11)、(31.12)、(31.15)，可知：

$$\hat{T}\hat{g}\hat{T}^{-1}=e^{i\hat{T}\hat{\boldsymbol{J}}\hat{T}^{-1}\cdot\boldsymbol{\alpha}/\hbar}=e^{-i\hat{\boldsymbol{J}}\cdot\boldsymbol{\alpha}/\hbar}=\hat{g}$$

即$\hat{T}$与转动算子互易，或$\hat{T}$与G可易）

$$\hat{T}\hat{g}=\hat{g}\hat{T},\ \hat{g}\in G \tag{31.52}$$

按上节的分析，$\hat{H}$的本征子空间总是由G的不可约子空间的直和组成，每个不可约子空间（维数）体现着能级的G简并。以$\mathscr{V}_E^{(i)}$表示属于能级E的一个不可约子空间，则是否有附加的$\hat{T}$简并，就看是否有$\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}\neq\mathscr{V}_E^{(i)}$。实际上由$\hat{T}$的反线性性及与$G$的可易性容易证明：如$\mathscr{V}_E^{(i)}$按表示$A^{(i)}(g)$变换，则$\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}$按表示$A^{(i)*}(g)$变换（$\hat{g}\psi_n^{(i)}=\sum\limits_{n'}A_{n'n}^{(i)}\psi_{n'}^{(i)}\Rightarrow\hat{g}(\hat{T}\psi_n^{(i)})=\hat{T}(\hat{g}\psi_n^{(i)})=\sum\limits_{n'}A_{n'n}^{(i)*}(\hat{T}\psi_{n'}^{(i)})$），因而$\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}$也是能级$E$的一个不可约子空间。因为两个不可约子空间只要有一个非零的共同矢量则必完全重合，$\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}$和$\mathscr{V}_E^{(i)}$要么相等，要么线性无关。$\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}=\mathscr{V}_E^{(i)}$意味着$\hat{T}$简并已含于$G$简并中，在保留$G$对称性的前提下，这种简并不因$\hat{T}$简并的破坏而消除；$\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}\neq\mathscr{V}_E^{(i)}$意味着$\hat{T}$对称性使原有的$G$简并度加倍

$$\mathscr{V}_E^{(i)}\longrightarrow\mathscr{V}_E^{(i)}\oplus\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)} \tag{31.53}$$

在保持G对称性和$\hat{T}$对称性的前提下改变$\hat{H}$，只能使不同的单元$(\mathscr{V}_E^{(i)}\oplus\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)})$之间发生分裂（不再属于同一能级），但每个这样的单元都不会分裂。当保留G对称性而破坏$\hat{T}$对称性时，每个单元将分裂为$\mathscr{V}_E^{(i)}$和$\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}$（这时因$\hat{T}$与$\hat{H}$不可对易，$\mathscr{V}_E^{(i)}$和$\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}$一般不再属于同一能级），但$\mathscr{V}_E^{(i)}$和$\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}$不会分裂。我们需要找出$\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}\neq\mathscr{V}_E^{(i)}$的条件。在$\mathscr{V}_E^{(i)}$内取一组正交归一基$\{\psi_k^{(i)}\}$，当$\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}=\mathscr{V}_E^{(i)}$时，有

$$\hat{T}\psi_k^{(i)}=\sum_{k'}S_{k'k}\psi_{k'}^{(i)} \tag{31.54}$$

$$S_{k'k}=(\psi_{k'}^{(i)},\hat{T}\psi_k^{(i)}) \tag{31.55}$$

由（31.16）和（31.41），有$(\psi_{k'}^{(i)},\ \hat{T}\psi_k^{(i)})=(\hat{T}^2\psi_k^{(i)},\hat{T}\psi_{k'}^{(i)})=(-1)^n(\psi_k^{(i)},\hat{T}\psi_{k'}^{(i)})$，即$S_{kk'}=(-1)^nS_{k'k}$，或写为矩阵等式

$$S=(-1)^n\tilde{S} \tag{31.56}$$

另一方面，$\mathscr{V}_E^{(i)}=\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}$是群$G$的不可约子空间，在基$\{\psi_k^{(i)}\}$和$\{\hat{T}\psi_k^{(i)}\}$下的表示矩阵分别为$A^{(i)}$和$A^{(i)*}$，而$S$是由第一组基到第二组基的变换矩阵，因而又有

$$A^{(i)}(g)^*=S^{-1}A^{(i)}(g)S, \quad g\in G \tag{31.57}$$

从而$(A^{(i)*}\sim A^{(i)})A^{(i)}$的特征标为实数

$$\chi^{(i)}(g)^*=\chi^{(i)}(g), \quad g\in G \tag{31.58}$$

由18.5节的(18.6)和(18.13)及上面的(31.56)又可进一步得到$\chi^{(i)}$的Wigner和

$$\sum_{g\in G}\chi^{(i)}(g^2)=(-1)^n N(G) \tag{31.59}$$

（在此假定G是有限的）。这是$\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}=\mathscr{V}_E^{(i)}$的必要条件。当这个条件不成立时，必有$\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}\neq\mathscr{V}_E^{(i)}$。由(18.13)可知，Wigner和只能取0和$\pm N(G)$三个值，所以

$$\sum_g\chi^{(i)}(g^2)\neq(-1)^n N(G)\Longleftrightarrow\sum_g\chi^{(i)}(g^2)$$
$$=0, \quad (-1)^{n+1}N(G)$$

由此得出$\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}\neq\mathscr{V}_E^{(i)}$，即$\hat{T}$对称性引起附加简并(31.53)的充分条件（判据）

$$\sum_{g\in G}\chi^{(i)}(g^2)=0 \quad 或\begin{cases} N(G), & 当n=奇数 \\ -N(G), & 当n=偶数 \end{cases} \tag{31.60}$$

其中n是体系中的电子数。因为$\sum_g\chi^{(i)}(g^2)=0\Longleftrightarrow\chi^{(i)}(g)^*\neq\chi^{(i)}(g)$，在实际运用(31.60)时可分两步进行：首先检验特征标的实性，如非实的，则(31.60)成立；如特征标为实的，再计算其Wigner和（只须判定其符号），对奇数个电子，这和为正时(31.60)成立；对偶数个电子，这和为负时(31.60)成立。

这里顺便给出 Kramers 简并的一个进一步的解释。对于 $\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}\neq\mathscr{V}_E^{(i)}$ 的 $\mathscr{V}_E^{(i)}$，简并的单元是$(\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}\oplus\mathscr{V}_E^{(i)})$，其维数自然是偶数$(2n_i)$；对于 $\hat{T}\mathscr{V}_E^{(i)}=\mathscr{V}_E^{(i)}$ 的 $\mathscr{V}_E^{(i)}$，简并单元即$\mathscr{V}_E^{(i)}$本身，其维数 n_i 即矩阵 S 的阶。当电子数 n 为奇数时，(31.56)化为 $S=-\tilde{S}$，取其行列式得 $\det S=(-1)^{n_i}\cdot\det S$。但 $\det S\neq0$ （S是基矢变换矩阵），故必有 $n_i=$偶数。所以能级E的简并度（它所包含的各单元的简并度之和）是偶数。

§32 对称性与能量的本征值问题

32.1 对称基（不可约基）的正交性

对于有限群和紧李群，其不可约表示的矩阵总可取为幺正矩阵，并在17.2节中证明了这些矩阵元作为群元的函数是彼此正交的。由此可以进一步证明，按不同的不可约表示变换或按同一不可约表示的不同列变换的态矢（波函数）也是正交的。

设$\{\psi_n^{(i)}\}$和$\{\varphi_m^{(j)}\}$分别为按群G的不可约表示$A^{(i)}$和$A^{(j)}$变换的两组态矢（对称基），则有下列正交关系

$$\langle\psi_n^{(i)}|\varphi_m^{(j)}\rangle=\lambda\delta_{ij}\delta_{nm}\tag{32.1}$$

其中 λ 是与 n 无关的常数。

由

$$\begin{aligned}\langle\psi_n^{(i)}|\varphi_m^{(j)}\rangle&=\langle\hat{g}\psi_n^{(i)}|\hat{g}\varphi_m^{(j)}\rangle\\&=\sum_{lk}\langle\psi_l^{(i)}|\varphi_k^{(j)}\rangle A_{ln}^{(i)}(g)^*A_{km}^{(j)}(g),\quad g\in G\end{aligned}$$

对上式两边作运算$\dfrac{1}{N(G)}\sum\limits_{g\in G}$，左边不变，右边利用正交定理(17.3)化为$\sum\limits_{lk}\langle\psi_l^{(i)}|\varphi_k^{(j)}\rangle\dfrac{1}{n_i}\delta_{ij}\delta_{kl}\delta_{nm}$，从而得

$$\langle\psi_n^{(i)}|\varphi_m^{(j)}\rangle=\left(\frac{1}{n_i}\sum_l\langle\psi_l^{(i)}|\varphi_l^{(j)}\rangle\right)\cdot\delta_{ij}\delta_{nm}$$

上式右边括号内的因子便是(32.1)中的 λ。

注意这个定理的结论中除$i\neq j$时或$n\neq m$时的正交性关系外，还包含第三项内容

$$\langle\psi_1^{(i)}|\varphi_1^{(i)}\rangle=\langle\psi_2^{(i)}|\varphi_2^{(i)}\rangle=\cdots=\langle\psi_{n_i}^{(i)}|\varphi_{n_i}^{(i)}\rangle=\lambda$$

即按同一不可约表示变换的两组矢量，两两对应矢量的内积相等。特别地，按不可约表示变换的每一组矢量有相同的长度。

这个定理适用的范围是：G为有限群或紧李群，而群的表示已取为幺正的。它在应用上的重要性在于，可以导致力学量矩阵元的计算的简化。本节中将利用这一点来处理能量的本征值问题；下节中将利用它导出应用上很重要的Wigner—Eckart定理。

32.2 对称基下的能量本征方程

关于物质结构的量子理论，其基本问题是求解体系的定态方程

$$\hat{H}\psi=E\psi \tag{32.2}$$

我们知道，对于稍为复杂一点的体系来说，要作出(32.2)的即使是近似的解析解，也是困难的。但如果知道体系的某种对称性，则可使方程得到相应的简化。设G为体系的对称群

$$[\hat{g},\ \hat{H}]=0,\quad g\in G \tag{32.3}$$

在态矢空间中取一组对称基（不可约基）$\{\psi_{pn}^{(i)}\}$，$\psi_{pn}^{(i)}$在群算子$\hat{g}$的作用下按G的不可约表示$A^{(i)}$的第n列变换，$p=1,2,\cdots a_i$用以标记有同样变换性质的不同基矢（a_i是$A^{(i)}$的重复度）。假定这组基已经归一化：$\langle\psi_{pn}^{(i)}|\psi_{pn}^{(i)}\rangle=1$。我们来计算$\hat{H}$在这组基下的矩阵元$\langle\psi_{pn}^{(i)}|\hat{H}|\psi_{p'n'}^{(i')}\rangle$。为此，记$\hat{H}|\psi_{p'n'}^{(i')}\rangle=|\varphi_{n'}^{(i')}\rangle$，并由(32.3)看出在$\hat{g}$的作用下$|\varphi_{n'}^{(i')}\rangle$的变换方式与$|\psi_{p'n'}^{(i')}\rangle$相同（按$A^{(i')}$的第$n'$列变换），代入(32.1)便得

$$H_{pin,p'i'n'}=\langle\psi_{pn}^{(i)}|\hat{H}|\psi_{p'n'}^{(i')}\rangle=h_{pp'}^{(i)}\cdot\delta_{ii'}\delta_{nn'} \tag{32.4}$$

其中

$$h_{pp'}^{(i)} = \langle \psi_{p1}^{(i)} | \hat{H} | \psi_{p'1}^{(i)} \rangle = \langle \psi_{p2}^{(i)} | \hat{H} | \psi_{p'2}^{(i)} \rangle = \cdots \tag{32.5}$$

可见在这个表象中$\hat{H}$关于对称指标i和n是对角化的。即$\hat{H}$只能混合具有相同变换性质（有相同的指标i和n）的基矢，而不能混合具有不同变换性质的基矢。所以，具有相同变换性质的基矢张成$\hat{H}$的一个不变子空间，而方程(32.1)便被约化为在每个这样的子空间中的本征方程。即

$$\begin{cases} \hat{h}^{(i)} \psi_n^{(i)} = E_n^{(i)} \\ \psi_n^{(i)} = \sum_{p=1}^{a_i} c_p^{(i)} \psi_{pn}^{(i)} \end{cases} \tag{32.6}$$

其中$\hat{h}^{(i)}$表示$\hat{H}$在相应子空间中的缩小，(32.5)已表明，它与n无关。由此可见，如$\psi_1^{(i)}$是$\hat{h}^{(i)}$的一个本征函数，则n_i个$\psi_1^{(i)}$，…，$\psi_{n_i}^{(i)}$都是属于同一能级的本征函数（n_i是$A^{(i)}$的维数）。因此，对每个i只有一个独立的方程(32.6)，而其每个本征值$E_k^{(i)}$都有简并度n_i（E的r重根的简并度为rn_i），相应的本征子空间仍是$A^{(i)}$的表示空间（或r个$A^{(i)}$的表示空间的直和）。

方程(32.6)便是$\hat{H}$的对称性G对方程(32.1)所能提供的原则上的简化。它使整个态矢空间中的本征方程分解为一些a_i维的子空间中的本征方程，而且对出现的每个$A^{(i)}$只有一个（独立的）方程，它的每个解给出一个能级和一组n_i度简并的本征函数。

在上面的讨论中由于应用了正交定理，我们仍假定G是有限群或紧李群。但上述结果的正确性并不受此限制。关于这一点请读者参照14.2节后面的讨论及(14.23)—(14.29)，其中对群G没有附加限制。

32.3 对称性与微扰论

假定$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$，$\hat{H}_0$是$\hat{H}$的主要部分，其本征值与本征函数假设为已知的，$\hat{H}'$是$\hat{H}$的微扰项。设$\hat{H}_0$的对称群为$G_0$，微扰的存在一般将导致对称性的下降，这时$\hat{H}$的对称群$G$应为$G_0$的一个子群。在一级微扰近似下，$\hat{H}$的本征函数应为$\hat{H}_0$的属于同一本征值的本征函数之线性组合。设$\hat{H}_0$的属于本征值$E_0$的本征函数$\{\varphi_1,\varphi_2,\cdots\varphi_n\}$所张成的本征子空间为$\mathscr{V}_{E_0}$，则对取定的$E_0$要求解的本征方程为

$$\hat{H}\psi=E\psi,\quad \psi\in\mathscr{V}_{E_0} \tag{32.7}$$

此方程与(32.1)的区别是，$\mathscr{V}_{E_0}$是有限维的，因而可以运用前面讲过的方法将$\mathscr{V}_{E_0}$按G的不可约表示约化，即具体作出对称基。

$\mathscr{V}_{E_0}$是$\hat{H}_0$的一个本征子空间，因而是G_0的表示空间，从而也是子群G的表示空间。应用对称性来处理方程(32.7)，可分为两步。首先是将$\mathscr{V}_{E_0}$按群G进行约化（作出不可约基）；其次是对所得的各不可约子空间再进行适当的加工：对于只出现一次（$a_i=1$）的子空间显然不需变动，它就是本征子空间；对于出现多次（$a_i>1$）的子空间，则需进行重新组合，组合的系数($c_p^{(i)}$)和相应的能级(E)由方程(32.6)确定。这样得出的新的a_i个不可约子空间（仍按$A^{(i)}$变换）便是分别属于a_i个能级（即(32.6)的a_i个本征值，但其中可能有相同的）的本征子空间。

现在以原子能级和定态问题为例来说明上述一般原理。为简单起见，暂不考虑电子的自旋和全同性效应。这时原子中的电子体系的$\hat{H}$可写为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'=\sum_k\hat{H}_k+\hat{H}' \tag{32.8}$$

设$\hat{H}_0$中已经包含了电子的相互作用中可用一平均有心力场(中

心在原子核处）代替的部分，$\hat{H}'$表相互作用的剩余部分（微扰），$\hat{H}_k$是单电子在核以及上述平均有心场中运动的哈密顿量。以$O(3)_k$表示只作用于第k个电子的坐标变量($\boldsymbol{r}_k$)的$O(3)$群，而以$O(3)$表示同时作用于所有电子的坐标变量($\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots$)的$O(3)$群。则显然有：$\hat{H}_0$的对称群为$O(3)_1 \times O(3)_2 \times \cdots$，$\hat{H}$的对称群为$O(3)$，且有

$$O(3) \subset O(3)_1 \times O(3)_2 \times \cdots \tag{32.9}$$

$\hat{H}_k$的本征值为ε_{nl}，本征函数为$\psi_{nlm}(k) = R_{nl}(r_k) \cdot Y_{lm}(\theta_k, \varphi_k)$。$\hat{H}_0$的本征值为$E_0 = \sum\limits_k \varepsilon_{n_k l_k}$，取决于电子在各单电子态中的分布（组态），属于$E_0$的本征函数（组）为

$$\begin{cases} \psi_{n_1 l_1 m_1}(1)\psi_{n_2 l_2 m_2}(2)\cdots \\ m_k = -l_k, -l_k+1, \cdots, l_k \end{cases} \tag{32.10}$$

这组函数张成E_0的本征子空间$\mathscr{V}_{E_0}$（维数为$\prod\limits_k (2l_k+1)$）。$\{\psi_{nlm}(k):\ m=0, \pm 1, \cdots, \pm l\}$按群$O(3)_k$的不可约表示$D^{(l,\sigma)} = \chi^{(\sigma)} D^{(l)}$变换，其中$D^{(l)}$是$SO(3)$的不可约表示，$\chi^{(\sigma)}$是点群$\{I, i\}$的不可约表示：$\chi^{(\sigma)}(i) = (-1)^l$（注意：$O(3) = \{I, i\} \times SO(3)$，而$\hat{i} Y_{lm} = Y_{lm}(\pi-\theta, \varphi-\pi) = (-1)^l Y_{lm}$）。可见，$\mathscr{V}_{E_0}$的基(32.10)按直积群$O(3)_1 \times O(3)_2 \times \cdots$的不可约表示

$$D^{(l_1,\sigma_1)}(1) \otimes D^{(l_2,\sigma_2)}(2) \otimes \cdots \tag{32.11}$$

变换。这个表示作为直积群的子群$O(3)$的表示则是可约的。它是$O(3)$的f（电子个数）个不可约表示的直积

$$D^{(l_1,\sigma_1)} \otimes D^{(l_2,\sigma_2)} \otimes \cdots = \chi^{(w)} \cdot D^{(l_1)} \otimes D^{(l_2)} \otimes \cdots \tag{32.12}$$

其中$\chi^{(w)}$是点群$\{I, i\}$的不可约表示

$$\chi^{(w)}(i) = (-1)^{\sum\limits_k l_k} \tag{32.13}$$

首先需将空间$\mathscr{V}_{E_0}$按$\hat{H}$的对称群$O(3)$的不可约表示进行分解，亦即将$O(3)$的表示(32.12)进行约化。这可以用22.3节

的办法，通过多次角动量的耦合来实现。最后将(32.12)化为

$$\sum_L a_L \chi^{(w)} D^{(L)} \tag{32.14}$$

$\mathscr{V}_{E_0}$ 的相应的不可约基由(32.10)重新组合构成，组合系数都是C—G系数的函数。可将新基写为$\{\Psi_{pM}^{(L)}\}$

$$\begin{cases} \hat{g}\Psi_{pM}^{(L)} = \sum\limits_{M'} D_{M'M}^{(L)}(g)\Psi_{pM'}^{(L)}, \quad g \in SO(3) \\ \hat{i}\Psi_{pM}^{(L)} = (-1)^{\sum\limits_k l_k} \Psi_{pM}^{(L)} \end{cases}$$

$$p = 1, 2, \cdots a_L \tag{32.15}$$

对于$a_L = 1$的L（这时可去掉指标p），不可约基

$$\Psi_L^{(L)}, \Psi_{L-1}^{(L)}, \cdots, \Psi_{-L}^{(L)} \tag{32.16}$$

即张成$\hat{H}$的一个本征子空间（$(2L+1)$维），所属的能级为

$$E^{(L)} = \langle \Psi_L^{(L)} | \hat{H} | \Psi_L^{(L)} \rangle \tag{32.17}$$

对于$a_L > 1$的L，为了得到$\hat{H}$的本征函数和本征值，需将$\Psi_{pM}^{(L)}$对指标p进行重新组合，组合系数和本征值同时由下列方程决定

$$\begin{cases} \hat{H}\phi_M^{(L)} = E\phi_M^{(L)} \\ \phi_M^{(L)} = \sum\limits_p c_p^{(L)} \Psi_{pM}^{(L)} \end{cases}, \quad M = L, \cdots, -L \tag{32.18}$$

解出a_L个解$(E_k^{(L)}, c_{pk}^{(L)}, k = 1, 2, \cdots, a_L)$，便得到$a_L$个能级（可能有相同的）和相应的本征子空间

$$\begin{cases} E_k^{(L)} \\ \phi_{kL}^{(L)}, \phi_{kL-1}^{(L)}, \cdots, \phi_{k-L}^{(L)} \end{cases} \quad k = 1, 2, \cdots, a_L \tag{32.19}$$

值得注意的是，这a_L个本征子空间仍然是$O(3)$的按同一表示$\chi^{(w)}D^{(L)}$变换的不可约子空间（将(32.18)代入(32.15)）

$$\begin{cases} \hat{g}\phi_{kM}^{(L)} = \sum\limits_{M'} D_{M'M}^{(L)}(g)\phi_{kM'}^{(L)}, \quad g \in SO(3) \\ \hat{i}\phi_{kM}^{(L)} = (-1)^{\sum\limits_k l_k} \phi_{kM}^{(L)} \end{cases}$$

$$k = 1, 2, \cdots, a_L \tag{32.20}$$

态$\phi_{kLM}^{(l)}$是角动量$\hat{L}^2$、$\hat{L}_z$和宇称$\hat{i}$有确定值的态，相应的量子数分别为L、M和$(-1)^{\sum_k l_k}$。这些力学量都是$O(3)$对称所提供的守恒量，因而其量子数都是好量子数，可作为定态的标记。量子数k不能由$O(3)$对称引出，是“非对称量子数”。

作为另一个例子，我们再考虑处于具有立方对称性的晶体场中的原子的能级和定态问题。这时原子中电子体系的哈密顿量可写为孤立原子的$\hat{H}_0$与晶体场的$\hat{H}'$之和，后者可看作微扰项。此处的$\hat{H}_0$即由(32.8)定义的$\hat{H}$，其对称群为$O(3)$，$\hat{H}'$的对称群为点群 $O_h=\{I,i\}\times O$，显然有 $O_h\subset O(3)$，O_h 也是$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$的对称群。现在$\hat{H}_0$的本征值与本征函数算作是已知的，由(32.19)给出。按一般程序，我们首先要将$\hat{H}_0$的每个本征子空间按$\hat{H}$的对称群O_h进行约化。例如，考虑一个$L=2$的本征子空间，并略去下标k，相应的能级和基矢可写为

$$\begin{cases} E^{(2)} \\ \phi_2^{(2)},\ \phi_1^{(2)},\ \phi_0^{(2)},\ \phi_{-1}^{(2)},\ \phi_{-2}^{(2)} \end{cases} \tag{32.21}$$

这个空间按$O(3)$的不可约表示

$$\chi^{(w)}D^{(2)} \tag{32.22}$$

变换。但这个表示作为子群O_h的表示是可约的，可用§20的投影算子方法进行约化。注意$\chi^{(w)}$是点群$\{I,i\}$的不可约(一维)表示，为了按O_h约化(32.22)，只须按O约化$SO(3)$的表示$D^{(2)}$。由(21.28)，$D^{(2)}$的特征标为

$$\chi^{(2)}(\alpha)=\sin\frac{5}{2}\alpha\Big/\sin\frac{\alpha}{2} \tag{32.23}$$

将它对子群O的值与O的单纯特征标（见§19）列于下表

O	I	$6C_2$	$8C_3$	$6C_4$	$3C_4^2$
χ_1	1	1	1	1	1
χ_2	1	-1	1	-1	1
χ_3	2	0	-1	0	2
χ_4	3	-1	0	1	-1
χ_5	3	1	0	-1	-1
$\chi^{(2)}(\alpha)$	5	1	-1	-1	1

容易看出

$$\chi^{(2)}\,|_O=\chi_3+\chi_5$$

从而有

$$D^{(2)}\,|_O=A^{(3)}\oplus A^{(5)} \tag{32.24}$$

$A^{(3)}$和$A^{(5)}$分别为点群O的第3个和第5个不可约表示，它们已在§19中作出。由此即可写出(32.22)作为点群O_h的表示的约化公式

$$\chi^{(w)}D^{(2)}\,|_{O_h}=\chi^{(w)}A^{(3)}\oplus\chi^{(w)}A^{(5)} \tag{32.25}$$

上式表明，$a_3=a_5=1$，$a_1=a_2=a_4=0$，可见相应的不可约基就是$\hat{H}$的本征函数，而不必再求解本征方程。为了将(32.21)重新组合成为O的不可约基，可用投影算子$p_{11}^{(3)}, p_{12}^{(3)}, p_{11}^{(5)}, p_{12}^{(5)}, p_{13}^{(5)}$作用于其中的任何矢量，得到的非零矢量便是不可约基

$$\psi_1^{(3)}, \psi_2^{(3)}, \psi_1^{(5)}, \psi_2^{(5)}, \psi_3^{(5)} \tag{32.26}$$

这些投影算子对基矢(32.21)的作用，可由它们在基(32.21)下的矩阵给出。由(20.5)有

$$p_{nm}^{(i)}=\frac{n_i}{24}\sum_{g\in O}A_{nm}^{(i)}(g)^*D^{(2)}(g) \qquad (32.27)$$

(32.25)中的前两个基矢和后三个基矢分别按O_h的不可约表示$\chi^{(w)}A^{(3)}$和$\chi^{(w)}A^{(5)}$变换，并张成$\hat{H}$的两个本征子空间，所属的能级分别为

$$E^{(3)}=\langle\psi_1^{(3)}|\hat{H}|\psi_1^{(3)}\rangle,\quad E^{(5)}=\langle\psi_1^{(5)}|\hat{H}|\psi_1^{(5)}\rangle \qquad (32.28)$$

上述方案的实质在于，将在$\hat{H}_0$的本征子空间中求解$\hat{H}$的本征方程（或将$\hat{H}$对角化）的问题转化为（至少是部分地）按$\hat{H}$的对称群来约化$\hat{H}_0$的本征子空间的问题。在上面这个例子中，通过将$L=2$的一个本征子空间（由(32.21)张成）的约化，完全代替了在这个5维空间中求解$\hat{H}$的本征方程的计算。

从这个例子还可看到，体系的能级在微扰作用下产生分裂的定性情形，是完全由微扰与原哈密顿量的对称性决定的，而微扰的具体形式只参与决定分裂的量值。例如，由(32.24)即可断言：原子的$L=2$的能级在立方对称的晶体场中将分裂为两条能级，一条是2度简并的，另一条是3度简并的。而这两条能级的数值则由$\hat{H}$的具体形式通过(32.28)来确定。

§33 对称性与力学量的矩阵元

33.1 算子的变换

在上节中我们讨论了对称性对于能量本征值问题的简化。这一简化的数学原理是：由于$\hat{H}$在对称变换下不变，它在对称基（不可约基）下的矩阵元关于基矢的对称指标是对角的，且与表示的列指标无关（见(32.4)式）。这一点可以推广。$\hat{H}$在G下不变也可以说它按G的单位表示变换，一般情形下可以考虑按G的任一不可约表示变换的一组算子，它们在不可约基下

的矩阵元也将是简单的（单由对称性可以断定一部分阵元为零，并可简化对非零阵元的计算）。本节将讨论这种一般情况。为此，首先要明确一下算子在空间的对称变换下所经历的变换的概念。

设$\mathscr{V}$为一线性空间，$\hat{F}$是$\mathscr{V}$上的线性算子，$\hat{g}$是群G在空间$\mathscr{V}$上的算子表示。如果$\hat{g}$将$\mathscr{V}$中的任意矢量ψ变为$\mathscr{V}$中的矢量ψ_g

$$\psi_g = \hat{g}\psi \tag{33.1}$$

我们定义算子$\hat{F}$被$\hat{g}$变为$\hat{F}_g$

$$\hat{F}_g = \hat{g}\hat{F}\hat{g}^{-1} \tag{33.2}$$

此定义显然满足如下条件

$$\hat{F}\psi = \psi' \Longleftrightarrow \hat{F}_g\psi_g = \psi'_g \tag{33.3}$$

或$\hat{F}$在基$\{\varphi_k\}$下的矩阵与$\hat{F}_g$在基$\{\hat{g}\varphi_k\}$下的矩阵相同。也可以由(33.3)来定义$\hat{F}_g$再导出(33.1)。显然，$\hat{F}_g$与$\hat{F}$具有相同的本征值谱，而相应的本征函数则差一变换$\hat{g}$。当$\hat{g}$为幺正的时，不难证明

$$\langle\psi_g|\hat{F}_g|\psi_g\rangle = \langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle \tag{33.4}$$

$$\hat{F}^+ = \hat{F} \Longleftrightarrow \hat{F}_g^+ = \hat{F}_g \tag{33.5}$$

当$\hat{g}$为反幺正时，如$\hat{F}$是自轭的（力学量），则(33.4)仍成立（注意这时有$\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle^*$）。注意到反幺正算子将正交归一基变为正交归一基，而$\hat{F}_g$在$\{\hat{g}\varphi_k\}$下的矩阵等于$\hat{F}$在$\{\varphi_k\}$下的矩阵，便可知：如$\hat{F}$在幺正基（即正交归一基）$\{\varphi_k\}$下的矩阵是自轭的，则$\hat{F}_g$在幺正基$\{\hat{g}\varphi_k\}$下的矩阵也是自轭的。因而(33.5)对反幺正变换$\hat{g}$也成立（一个线性算子自轭的充要条件是，它在幺正基下的矩阵自轭）。

(33.4)和(33.5)表明了力学量的算子经历一个幺正或反幺正变换的物理意义。

特别地，当$\hat{F}$中只包含对空间坐标的运算（形式地记为

$\hat{F}(\boldsymbol{r})$)，而 g 为坐标空间的操作时，显然可写

$$\hat{g}\hat{F}(\boldsymbol{r})\hat{g}^{-1}=\hat{F}(\hat{g}^{-1}\boldsymbol{r}) \tag{33.6}$$

设$\mathscr{V}$为 n 维线性空间，则$\mathscr{V}$上的线性算子（$n\times n$的矩阵）的全体$\{\hat{F}\}$对加法和数乘运算形成一个 n^2 维的线性空间。(33.2)对每个群元 g 定义了空间$\{\hat{F}\}$上的一个线性算子（假定 $\hat{g}$ 是线性的）$\hat{\hat{g}}$，它将 $\hat{F}$ 变为 $\hat{F}_g$

$$\hat{\hat{g}}\hat{F}=\hat{g}\hat{F}\hat{g}^{-1} \tag{33.7}$$

如果 $\hat{g}$ 为群G在空间$\mathscr{V}$上的表示（n 维），则$\hat{\hat{g}}$便是群 G在空间$\{\hat{F}\}$上的一个表示（n^2维）。映射 $g\to\hat{\hat{g}}$的同态性质易由(33.7)加以验证。

33.2 不可约张量算子

(1) 一般定义

不可约张量算子是指在群G的变换下按群的一个不可约表示变换的算子组，或构成群G的一组不可约基（对表示$\hat{\hat{g}}$）的算子组。按G的不可约表示 $A^{(i)}$变换的不可约张量算子可记作$\{\hat{F}_k^{(i)}: k=1,2,\cdots,n_i\}$（$n_i$是 $A^{(i)}$的维数）

$$\hat{g}\hat{F}_k^{(i)}\hat{g}^{-1}=\sum_{k'}A_{k'k}^{(i)}(g)\hat{F}_{k'}^{(i)},\quad g\in G \tag{33.8}$$

或写为

$$\hat{\hat{g}}\hat{F}_k^{(i)}=\sum_{k'}A_{k'k}^{(i)}(g)\hat{F}_{k'}^{(i)}\qquad g\in G \tag{33.9}$$

(33.8)或(33.9)是群G的不可约张量算子的普遍定义，对有限群和李群都适用。

(2) 李群的不可约张量算子

由于李群的表示可由它的无穷小生成元（即李代数）的表示确定，关于李群的不可约张量算子又可以用更为简捷的方式来定义。按(23.23)，李群的群算子可写为

$$\hat{g}(\alpha)=e^{\sum_l \hat{I}_l \alpha_l} \tag{33.10}$$

其中$\{\hat{I}_l\}$为G的生成元算子，即李代数（算子形式）的基。类似地，不可约表示矩阵$A^{(i)}$也可写为

$$A^{(i)}(\alpha)=e^{\sum_l I_l^{(i)} \alpha_l} \tag{33.11}$$

其中$\{I_l^{(i)}\}$是李代数（基）的不可约表示矩阵。在单位元的邻域（对小参数α），以上二式可写为

$$\hat{g}(\alpha)=\hat{I}+\sum_l \hat{I}_l \alpha_l \tag{33.12}$$

$$A^{(i)}(\alpha)=I^{(i)}+\sum_l I_l^{(i)} \alpha_l \tag{33.13}$$

将此二式代入(33.8)，只保留α的一次幂项，得出

$$[\hat{I}_l, \hat{F}_k^{(i)}]=\sum_{k'}(I_l^{(i)})_{k',k} \hat{F}_{k'}^{(i)} \tag{33.14}$$

可见，算子$\hat{F}_k^{(i)}$的变换性质(33.8)也可用它们与群生成元算子的对(33.14)易关系来等价地表达。如将群算子$\hat{\hat{g}}$也写成对于参数α的指数函数的形式

$$\hat{\hat{g}}(\alpha)=e^{\sum_l \hat{\hat{I}}_l \alpha_l} \simeq \hat{\hat{I}}+\sum \hat{\hat{I}}_l \alpha_l \tag{33.15}$$

则由(33.9)，又可将(33.14)写为

$$\hat{\hat{I}}_l \hat{F}_k^{(i)}=\sum_{k'}(I_l^{(i)})_{k'k} \hat{F}_{k'}^{(i)} \tag{33.16}$$

(33.14)便是李群的不可约张量算子的Racah定义。(33.16)表明，满足对易关系(33.14)的算子$\hat{F}_k^{(i)}$按李代数（基）$\{\hat{\hat{I}}_l\}$的不可约表示$\{I_l^{(i)}\}$变换，亦即按G的表示$A^{(i)}$变换。

定义(33.8)明显地刻画了不可约张量算子的变换性质，因而更直接地反映出这个概念的物理意义；而定义(33.14)则便于进行计算（对易关系），因而在应用上非常方便。所以，对李群主要使用后一定义。

(3) 半单紧李群的不可约张量算子

对于半单李群，由于其不可约表示具有用权来表达的标准形状，(33.14)可以更为明显的写成一种标准形式。首先，我们用半单李代数的标准基 $\{\hat{H}_i, \hat{E}_\alpha\}$（参阅(24.55)）来取代自然基$\{\hat{I}_l\}$。然后，对此半单李代数的不可约表示采用标准记法，用M表其首权，其任意权用m表示；不可约表示的基矢用其所属的权（$\{\hat{H}_i\}$的本征值）来标记，当权m简并时，属于同一权的不同基需用附加简并指标k来区分。从而不可约基可记为

$$\psi^{(M)}_{m,k} = |M, m, k\rangle \tag{33.17}$$

由(25.28)和(25.29)可知，在此基下的表示矩阵有简单的形状：$\hat{H}_i$是对角的，$\hat{E}_\alpha$ 只有$m'=(m+\alpha)$的子块不为零。即有

$$\begin{cases} \hat{H}_i\psi^{(M)}_{m,k} = m_i\psi^{(M)}_{m,k} \\ \hat{E}_\alpha\psi^{(M)}_{m,k} = \sum\limits_{k'}(\hat{E}_\alpha)_{m+\alpha,k';m,k}\psi^{(M)}_{m+\alpha,k'} \end{cases} \tag{33.18}$$

上式中已假定$(m+\alpha)$也是权，这时 $\psi^{(M)}_{m+\alpha,k'}$ 才是(33.17)中的基矢；若 $m+\alpha$ 不是权，$\psi^{(M)}_{m+\alpha,k'}$ 没有定义，按(25.29)，这时 $\hat{E}_\alpha\psi^{(M)}_{m,k}=0$。如果约定，$(m+\alpha)$ 不是表示 (M) 的权时，$\psi^{(M)}_{m+\alpha,k}\equiv 0$，则不必假定$(m+\alpha)$是权，公式对所有$m$（属于表示$(M)$的）成立。

因为G是紧的，群算子$\hat{g}$总可取为幺正的，因而群$\{\hat{g}\}$的李代数由反厄米算子构成

$$(\hat{g}=e^{\hat{v}}, \hat{g}^+=\hat{g}^{-1} \Longleftrightarrow \hat{v}^+=-\hat{v})。$$

又，紧李代数是其复扩充的紧实形，按(24.104)，$\{\hat{v}\}$的基可由其复扩充的标准基表为

$$\begin{cases} \hat{H}'_i=\sqrt{-1}\hat{H}_i \\ \hat{U}_\alpha=\hat{E}_\alpha-\hat{E}_{-\alpha} & \alpha>0 \\ \hat{V}_\alpha=\sqrt{-1}(\hat{E}_\alpha+\hat{E}_{-\alpha}) \end{cases} \tag{33.19}$$

而$\hat{O}$是这组基的实系数组合。$\hat{O}$是反厄米的，要求这组基也是反厄米的，由(33.19)知，必有

$$\begin{cases}\hat{H}_i^+=\hat{H}_i\\ \hat{E}_\alpha^+=\hat{E}_{-\alpha}\end{cases}\tag{33.20}$$

$\hat{H}_i$的厄米性保证了基$|M,m,k\rangle$对指标（权）m的正交性，另一方面总可将$|M,m,k\rangle$对简并指标k正交化。总之，可将$|M,m,k\rangle$取为不可约表示(M)的幺正（正交归一）基。(33.18)又可写为

$$\begin{cases}\hat{H}_i\,|M,m,k\rangle=m_i\,|M,m,k\rangle\\ \hat{E}_\alpha\,|M,m,k\rangle=\sum\limits_{k'}\langle M,m+\alpha,k'\,|\hat{E}_\alpha\,|M,m,k\rangle|\,M,m+\alpha,k'\rangle\end{cases}\tag{33.21}$$

上式确定了$\{\hat{H}_i,\hat{E}_\alpha\}$的不可约表示$(M)$的矩阵元，通过(33.19)给出李代数$\{\hat{O}\}$的不可约表示$(M)$的矩阵。对$|M,m,k\rangle$我们已约定

$$|M,m,k\rangle\equiv 0，\text{当}m\text{不是权}\tag{33.22}$$

由(33.21)可知，对半单紧李群，不可约张量算子的定义(33.14)和(33.16)可化为

$$\begin{cases}\hat{\hat{H}}_i\hat{F}^{(M)}_{m,k}=[\hat{H}_i,\hat{F}^{(M)}_{m,k}]=m_i\hat{F}^{(M)}_{m,k}\\ \hat{\hat{E}}_\alpha\hat{F}^{(M)}_{m,k}=[\hat{E}_\alpha,\hat{F}^{(M)}_{m,k}]=\sum\limits_{k'}\langle M,m\\ \qquad\qquad +\alpha,k'\,|\hat{E}_\alpha\,|M,m,k\rangle\,\hat{F}^{(M)}_{m+\alpha,k'}\end{cases}\tag{33.23}$$

其中仍约定

$$\hat{F}^{(M)}_{m,k}\equiv 0，\text{当}m\text{不是}(M)\text{的权}\tag{33.24}$$

(33.23)与(33.14)的差别在于：(33.14)中的$\{\hat{I}_l\}$是李群的任意一组生成元，而(33.23)中的$\{\hat{H}_i,\hat{E}_\alpha\}$是半单李群的一组标准生成元；(33.14)中的$\hat{F}^{(i)}_k$是按一般不可约表示矩阵$\{I^{(i)}_l\}$变

换（分类）的，而(33.23)中的$\hat{F}^{(M)}_{m,k}$则是按以权为标记的不可约矩阵(33.21)变换（分类）的。

例 $SO(3)$的不可约张量算子

对$SO(3)$群，前面给出的不可约表示$D^{(J)}$实际上是以权来标记的，其基矢为$|J,m\rangle$，J是首权，m是权。$SO(3)$是1秩的半单（紧）李群，所以权矢量只有一个分量。这时有

$$\hat{H}_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{J}_3,\quad \hat{E}_{\frac{1}{\sqrt{2}}}=\frac{1}{2}\hat{J}_+,\quad \hat{E}_{-\frac{1}{\sqrt{2}}}=\frac{1}{2}\hat{J}_-$$

($SO(3)$的李代数是

$$\hat{H}'_1=i\hat{H}_1=\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{J}_3,\quad \hat{U}_{\frac{1}{\sqrt{2}}}=\hat{E}_{\frac{1}{\sqrt{2}}}-\hat{E}_{-\frac{1}{\sqrt{2}}}=i\hat{J}_2,$$

$$\hat{V}_{\frac{1}{\sqrt{2}}}=i\left(\hat{E}_{\frac{1}{\sqrt{2}}}+\hat{E}_{-\frac{1}{\sqrt{2}}}\right)=i\hat{J}_1$$

的实系数组合，见(22.1)式)。注意到(21.20)式，可将$SO(3)$的不可约张量算子的两种定义写为（权m不简并，不存在简并指标k）

$$\hat{\hat{g}}\hat{F}^{(J)}_m=\hat{g}\hat{F}^{(J)}_m\hat{g}^{-1}=\sum_{m'}D^{(J)}_{m'm}(g)\hat{F}^{(J)}_{m'} \qquad (33.25)$$

$$\begin{cases}\hat{\hat{J}}_3\hat{F}^{(J)}_m=[\hat{J}_3,\hat{F}^{(J)}_m]=\hbar m\hat{F}^{(J)}_m\\ \hat{\hat{J}}_+\hat{F}^{(J)}_m=[\hat{J}_+,\hat{F}^{(J)}_m]=\hbar\sqrt{J(J+1)-m(m+1)}\,\hat{F}^{(J)}_{m+1}\\ \hat{\hat{J}}_-\hat{F}^{(J)}_m=[\hat{J}_-,\hat{F}^{(J)}_m]=\hbar\sqrt{J(J+1)-m(m-1)}\,\hat{F}^{(J)}_{m-1}\end{cases} \qquad (33.26)$$

下面我们列举一些$SO(3)$的不可约张量算子的具体例子。粒子的力学量$\hat{\boldsymbol{r}}$、$\hat{\boldsymbol{p}}$、$\hat{\boldsymbol{L}}$、$\hat{\boldsymbol{S}}$和$\hat{\boldsymbol{J}}$的直角坐标分量在空间转动下都按矢量规律变换（注意(33.6)式），即按$SO(3)$的自然的表示变换。自然表示是三维的不可约表示，故必等价于表示$D^{(1)}$。所

以上述这些矢量算子的适当的分量算子是按$SO(3)$的表示$D^{(1)}$变换的不可约张量算子。由自然表示到$D^{(1)}$的相似变换的矩阵为

$$S=\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{33.27}$$

这一点可如下看出，令

$$\begin{aligned} r_1 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(x+iy) \\ r_0 &= z \\ r_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x-iy) \end{aligned} \tag{33.28}$$

即

$$(r_1, r_0, r_{-1}) = (x, y, z)S \tag{33.29}$$

则由球函数$Y_{lm}(\theta,\varphi)$的定义可得

$$r_m=\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{-\frac{1}{2}}\cdot r\cdot Y_{1m}(\theta,\varphi) \tag{33.30}$$

已知在旋转操作下$\{Y_{11}, Y_{10}, Y_{1-1}\}$按 $D^{(1)}$ 变换，上式表明，$\{r_1, r_0, r_{-1}\}$也按$D^{(1)}$变换（注意$r=(x^2+y^2+z^2)^{\frac{1}{2}}$在旋转下不变）。变换(33.29)也可用于任何其他矢量算子，(33.27)给出了任何矢量的直角分量到$D^{(1)}$的不可约基的变换公式。如将上述矢量算子记作$\hat{\boldsymbol{F}}$

$$(\hat{F}_1^{(1)}, \hat{F}_0^{(1)}, \hat{F}_{-1}^{(1)}) = (\hat{F}_x, \hat{F}_y, \hat{F}_z)S \tag{33.31}$$

则也可以由已知的对易关系直接证明，它们满足定义(33.26)（$J=1$）。

标量算子r、$\hat{P}^2$、$\hat{L}^2$、$\hat{S}^2$、$\hat{J}^2$，在旋转下不变，即按$SO(3)$的单位表示$D^{(0)}$变换，也可由对易关系证明它们都满足$J=0$时的(33.26)。对于有心力场中的体系，$\hat{H}$ 也是 $SO(3)$标量（不变量）。

我们已知球函数$\{Y_{lm}(\theta,\varphi): m=0,\pm1,\cdots,\pm l\}$在转动下按$SO(3)$的表示$D^{(l)}$变换，当将它们看作是力学量的算子（作用于波函数即相乘）时，由(33.6)有

$$\hat{g}Y_{lm}(\boldsymbol{r}_0)\hat{g}^{-1}=Y_{lm}(g^{-1}\boldsymbol{r}_0)=\hat{g}Y_{lm}(\boldsymbol{r}_0)$$
$$=\sum_{m'}D^{(l)}_{m'm}(g)Y_{lm'}(\boldsymbol{r}_0)$$

可见作为力学量它们是 $SO(3)$的按 $D^{(l)}$变换的不可约张量算子。如果将Y_{lm}代入对易关系(33.26)，并注意

$$[\hat{J}_i,f(\boldsymbol{r})]=[\hat{L}_i,f(\boldsymbol{r})]=\hat{L}_if(\boldsymbol{r}),$$

以及关系

$$\begin{cases}\hat{L}_3Y_{lm}=\hbar mY_{lm}\\ \hat{L}_+Y_{lm}=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}Y_{lm+1}\\ \hat{L}_-Y_{lm}=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}Y_{lm-1}\end{cases}$$

也可直接证明它们满足定义(33.26)($J=l$)。

例 $O(3)$及分子点群的不可约张量算子

$O(3)$群是$SO(3)$与点群C_i的直积，它的不可约表示可由后二者的不可约表示的直积构成，一般可写

$$D^{(J,\sigma)}=\chi^{(\sigma)}D^{(J)} \tag{33.32}$$

$$\chi^{(\sigma)}(i)=(-1)^{\sigma},\quad \sigma=0,1 \tag{33.33}$$

$D^{(J,\sigma)}$的不可约基可记为$\psi^{(J,\sigma)}_M$，不可约张量算子可记为$\{\hat{F}^{(J,\sigma)}_M: M=-J,-J+1,\cdots,J\}$。$\hat{F}^{(J,\sigma)}_M$除了满足(33.25)或(33.26)之外，还满足

$$\hat{\hat{i}}\hat{F}^{(J,\sigma)}_M=\hat{i}\hat{F}^{(J,\sigma)}_M\hat{i}=(-1)^{\sigma}\hat{F}^{(J,\sigma)}_M \tag{33.34}$$

注意到力学量$\hat{\boldsymbol{r}}$和$\hat{\boldsymbol{p}}$在反演(i)操作下是矢量，而$\hat{\boldsymbol{L}}$、$\hat{\boldsymbol{S}}$、$\hat{\boldsymbol{J}}$在

反演下是赝矢量，便可知道（由(33.34)），$\{\hat{r}_1,\hat{r}_0,\hat{r}_{-1}\}$和$\{\hat{p}_1,\hat{p}_0,\hat{p}_{-1}\}$是属于$D^{(1,1)}$的不可约张量算子，而$\{\hat{L}_1,\hat{L}_0,\hat{L}_{-1}\}$和$\{\hat{S}_1,\hat{S}_0,\hat{S}_{-1}\}$、$\{\hat{J}_1,\hat{J}_0,\hat{J}_{-1}\}$是属于$D^{(1,0)}$的不可约张量算子。类似地可看出，以上各矢量算子和赝矢算子的平方算子都是标量算子，属于$D^{(0,0)}$。最后，由$\hat{i}Y_{lm}=(-1)^l Y_{lm}$可知，当$l$为偶数时，$\{Y_{lm}\}$是属于$D^{(l,0)}$的不可约张量算子；当$l$为奇数时，$\{Y_{lm}\}$是属于$D^{(l,1)}$的不可约张量算子。

分子点群都是$O(3)$的子群，因而$O(3)$的不可约张量算子一般不是分子点群的不可约张量算子，但总可以将这些算子重新组合（约化）为分子点群的不可约张量算子。下面仅以C_{3v}和$C_{\infty v}\cong O(2)$为例来说明这一点。

C_{3v}是$O(3)$的一个有限子群，它有三个不可约表示：$A^{(1)}$，$A^{(2)}$，$A^{(3)}$。$A^{(1)}$和$A^{(2)}$是一维的，前者是单位表示，恒为1；后者对第一类操作为1，对第二类操作为(-1)。$A^{(3)}$是二维的，等价于C_{3v}在xy平面（z轴取为C_3的转轴）上的自然表示。考虑力学量$\hat{r}$，因在C_{3v}的操作下z不变而(x,y)按$A^{(2)}$变换，从而可知：$\hat{z}$是属于$A^{(1)}$的不可约张量算子，$\hat{x},\hat{y}$是属于$A^{(2)}$的不可约张量算子（$A^{(2)}$取自然表示的矩阵）。或者将$\hat{r}$的分量取为$\hat{r}_0$、$\hat{r}_1$、$\hat{r}_{-1}$，则$\hat{r}_0$按$A^{(1)}$变换，$(\hat{r}_1,\hat{r}_{-1})$按$A^{(2)}$变换（由自然表示经变换(33.27)）。后一种分量形式的优点是，当限于C_{3v}的子群C_3时，$\hat{r}_0,\hat{r}_1,\hat{r}_{-1}$分别按$C_3$的三个一维表示变换（注意这时$A^{(2)}$对于$C_3$的操作是对角的）。类似地，考虑力学量$\hat{L}=(\hat{L}_1,\hat{L}_0,\hat{L}_{-1})$，由于$\hat{L}$是赝矢，它的变换矩阵应为$\hat{r}$的变换矩阵乘以$A^{(2)}$。由此可知：在$C_{3v}$下$\hat{L}_0$按$A^{(2)}$变换，$(\hat{L}_1,\hat{L}_{-1})$按$A^{(2)}\cdot A^{(3)}$变换，而$A^{(2)}\cdot A^{(3)}$与$A^{(3)}$等价（由特征标容易看出）；$\hat{L}_0,\hat{L}_1,\hat{L}_{-1}$在$C_3$群下，分别按三个一维表示变换。任何矢量算子与$\hat{r}$的变换性质相同，任何赝矢算子与$\hat{L}$的变换性质相同，它们（$F_1,F_0,F_{-1}$分量）在群链$O(3)\supset C_{3v}\supset C_3$下分别

按表示

$$D^{(1,1)}\to A^{(1)}\oplus A^{(3)}\to\gamma^{(0)}\oplus\gamma^{(1)}\oplus\gamma^{(-1)}$$

$$D^{(1,0)}\to A^{(2)}\oplus A^{(2)}A^{(3)}\to\gamma^{(0)}\oplus\gamma^{(1)}\oplus\gamma^{(-1)}$$

变换。其中$\gamma^{(i)}$表群C_3的不可约表示（一维）。

$C_{\infty v}\cong O(2)$也是$O(3)$的子群，它的不可约表示已在15.5节中作出，共有两个一维的（$A^{(0^+)}$和$A^{(0^-)}$，$A^{(0^+)}$是单位表示，$A^{(0^-)}$对第一类操作为1，对第二类操作为(-1)）和无穷个二维的（$A^{(\Lambda)}$。$\Lambda=1,2,\cdots$）。将群$C_{\infty v}$的轴取为z轴，则z轴和xy平面显然是$C_{\infty v}$的两个不变子空间，在$C_{\infty v}$的操作下分别按表示$A^{(0^+)}$和$A^{(1)}$变换（参见(15.40)和(15.41)）。由此可知，$\hat{r}_0$是按$A^{(0^+)}$变换的不可约张量算子，而$\{\hat{r}_1,\hat{r}_{-1}\}$是按$A^{(1)}$变换的不可约张量算子。实际上对$\{\hat{r}_1,\hat{r}_{-1}\}$，$A^{(1)}$取(15.40)的形状，对$\{\hat{x},\hat{y}\}$，$A^{(1)}$取(15.41)的形状（$\Lambda=1$）。(15.40)表明，若限于$O(2)$的子群$SO(2)$，则$\hat{r}_0$、$\hat{r}_1$、$\hat{r}_{-1}$分别按$SO(2)$的不可约表示（一维）$\gamma^{(0)}$、$\gamma^{(1)}$、$\gamma^{(-1)}$变换（$\gamma^{(m)}(\varphi)=e^{im\varphi}$）。量$\hat{\boldsymbol{L}}$的变换性质与$\hat{\boldsymbol{r}}$的变换性质（对于$C_{\infty v}$）只差一因子$A^{(0^-)}$，因而$\hat{L}_0$按$A^{(0^-)}$变换，$\{\hat{L}_1,\hat{L}_{-1}\}$按$A^{(0^-)}\cdot A^{(1)}$变换。对于$SO(2)$，$\hat{L}_0,\hat{L}_1,\hat{L}_{-1}$分别按$\gamma^{(0)},\gamma^{(1)},\gamma^{(-1)}$变换。总之，矢量算子和赝矢算子（$F_1$、$F_0$、$F_{-1}$分量）在群链$O(3)\supset C_{\infty v}\supset SO(2)$下将分别按表示

$$D^{(1,1)}\to A^{(0^+)}\oplus A^{(1)}\to\gamma^{(0)}\oplus\gamma^{(1)}\oplus\gamma^{(-1)}$$

$$D^{(1,0)}\to A^{(0^-)}\oplus A^{(0^-)}A^{(1)}\to\gamma^{(0)}\oplus\gamma^{(1)}\oplus\gamma^{(-1)}$$

变换。注意，表示$A^{(0^-)}A^{(1)}$与$A^{(1)}$等价。

33.3 Wigner—Eckart定理

现在我们再回到本节开始时所提出的问题，考虑力学量的矩阵元的计算。假如我们已知状态按某一群G（它不一定是体系的对称群）的分类，即已知G的一组不可约基$\{|pin\rangle\}$，指标i是不可约表示的标记，n是表示的列标，p是表示(i)的

重复脚标。为了计算力学量$\hat{F}$在这组基下的矩阵元，可先设法将$\hat{F}$展为G的一些不可约张量算子的线性组合，然后再计算各不可约张量算子的矩阵元。从而问题归结为考虑如下形状的矩阵元：$\langle qjm|\hat{F}_l^{(k)}|pin\rangle$。这里的不可约基和不可约张量算子是按同一个群$G$分类的，$i$、$j$、$k$是不可约表示的标记，$n$、$m$、$l$是所属表示的列标，$p$、$q$用以区分属于同一表示（即有相同变换性质）的不同状态。以下假定G是有限群或紧李群。

为了利用不可约基的正交性来分析上述矩阵元的性质，先考查态矢$\hat{F}_l^{(k)}|pin\rangle$在$G$下的变换性质：由$\hat{g}(\hat{F}_l^{(k)}|pin\rangle)=\hat{g}\hat{F}_l^{(k)}\hat{g}^{-1}\hat{g}|pin\rangle$及(33.8)可以看出，$\hat{F}_l^{(k)}|pin\rangle$（对给定的$k$、$i$、$p$）在$G$下按表示$A^{(k)}\otimes A^{(i)}$变换。因而可以通过群$G$的C—G系数将$\hat{F}_l^{(k)}|pin\rangle$组合成为不可约基（即将表示$A^{(k)}\otimes A^{(i)}$约化）

$$|F,k,pi,ri'n'\rangle=\sum_{ln}S^{(ki)}_{ln,ri'n'}\hat{F}_l^{(k)}|pin\rangle$$

在上式中，新的不可约基中使用了三组标记，r、i'、n'的意义与p、i、n相同，F表示它对于算子$\hat{F}$的形式的依赖，k表示它与$\hat{F}$所属的不可约表示有关，而p和i分别表示它与态$|pin\rangle$的具体形式和所属的不可约表示有关。C——G系数$S^{(ki)}_{ln,ri'n'}$即为约化表示$A^{(k)}\otimes A^{(i)}$的相似变换矩阵$S^{(ki)}$的阵元（ln和$ri'n'$分别为其行标和列标）

$$S^{(ki)+}A^{(k)}\otimes A^{(i)}S^{(ki)}=\sum_{i'}a_{i'}A^{(i')} \qquad (33.35)$$

因为G是紧的，表示总可取为幺正的，故此处的S矩阵也已取为幺正的。现在利用S的幺正性将$\hat{F}_l^{(k)}|pin\rangle$解出

$$\hat{F}_l^{(k)}|pin\rangle=\sum_{ri'n'}S^{(ki)*}_{ln,ri'n'}|Fk,pi,ri'n'\rangle \qquad (33.36)$$

将此式代入矩阵元$\langle qjm|\hat{F}_l^{(k)}|pin\rangle$，并应用关于不可约基的正交性定理(32.1)，便得到

$$\langle qjm|\hat{F}_l^{(k)}|pin\rangle=\sum_r S_{ln,rjm}^{(ki)*}\langle qjm|Fk,pi,rjm\rangle \tag{33.37}$$

这就是在群论的应用中占有重要地位的 Wigner——Eckart 定理。注意上式中的$\langle qjm|Fk,pi,rjm\rangle$是与指标 m 无关的，它只依赖于 qj,Fk,pi 以及 $A^{(j)}$ 的重复指标 r，故通常被记作$\langle qj||\hat{F}^{(k)}||pi\rangle_r$并称为“约化矩阵元”。如对C——G 系数取如下记号

$$(klin|rjm)=S_{ln,rjm}^{(ki)} \tag{33.38}$$

则(33.37)式又可写为

$$\langle qjm|\hat{F}_l^{(k)}|pin\rangle=\sum_{r=1}^{a_j}(klin|rjm)^*\langle qj||\hat{F}^{(k)}||pi\rangle_r \tag{33.39}$$

其中a_j是$A^{(j)}$在$A^{(k)}\otimes A^{(i)}$中的重复度。

当群G为简单可约的，即其任二不可约表示的直积中各不可约表示至多出现1次时，可略去指标r，(33.39)化为

$$\langle qjm|\hat{F}_l^{(k)}|pin\rangle=(klin|jm)^*\cdot\langle qj||\hat{F}^{(k)}||pi\rangle \tag{33.40}$$

可见矩阵元被分解为两个因子的乘积：第一个因子是群G的C——G系数，完全取决于始、末态和张量算子的变换性质（对称性）；而与三者的具体形式（物理内容）无关，故称为“几何因子”；第二个因子是约化矩阵元，它包含着关于始、末态及张量算子的具体形式中的“物理的”信息。对于已知的群G,它的C——G系数原则上总可算出,并定性地知道其许多有用的性质。故由 Wigner——Eckart 定理，我们能够单由始、末态和张量算子的变换性质得出关于矩阵元的一系列有用的结论。

群$SO(3)$是简单可约的，因而可用(33.40)式。$SO(3)$的不可约表示是用角动量平方的量子数j（首权）来标记的，其

列标用角动量投影量子数 m（权）来标记。于是，关于$SO(3)$的Wigner——Eckart 定理应写为

$$\langle qj_3m_3|\hat{F}^{(j_1)}_{m_1}|pj_2m_2\rangle=(j_1m_1j_2m_2|j_3m_3)\langle qj_3\|\hat{F}^{(j_1)}\|pj_2\rangle$$
$$=(-1)^{j_1-j_2+m_3}\sqrt{2j_3+1}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & -m_3 \end{pmatrix}\langle qj_3\|\hat{F}^{(j_1)}\|pj_2\rangle \tag{33.41}$$

其中已注意到$SO(3)$的C——G系数取为实数并可用$3j$符号(22.46)表示。

W——E定理将一般矩阵元的计算归结为C——G系数和约化矩阵元的计算。C——G系数原则上可以用群论方法来计算（不可约表示的直积的约化），对于多数常用群已经作出了它们的数值表或解析公式。因而“几何因子”可以看作是已经规格化了的，需要具体计算的是约化矩阵元。由(33.41)可知，为了计算约化矩阵元，只需对一组特殊选取的(m_1,m_2,m_3)计算矩阵元。例如，对于角动量算子$\hat{\boldsymbol{J}}$（$j=1$的不可约张量算子），为了计算其约化矩阵元$\langle qj_3\|\hat{J}\|pj_2\rangle$，可令(33.41)中的$(m_1,m_2,m_3)=(0,j_2,j_3)$，这时等式左边为$\langle qj_3j_3|\hat{J}_0|pj_2j_2\rangle=\hbar j_2\langle qj_2j_2|pj_2j_2\rangle\delta_{j_2j_3}$，右边的几何因子为$(1\,0j_2j_2|j_3j_3)=-\sqrt{\frac{j_2}{j_2+1}}\cdot\delta_{j_2j_3}$（可由(22.45)得出），从而得

$$\langle qj_3\|\hat{J}\|pj_2\rangle=-\hbar\sqrt{j_2(j_2+1)}\cdot\delta_{j_2j_3}\langle qj_2j_2|pj_2j_2\rangle$$

关于$SO(3)$群的W——E定理在量子力学中的应用，可参阅角动量理论方面的书籍[22]。

33.4 选择定则与强度定则

W——E定理将那些单由对称性所决定的矩阵元的性质通过几何因子分离了出来，由此便可推断体系的对称性的某些物理效应，而不必计算约化矩阵元。我们考虑G为简单可约的情

况，这时的W——E定理为(33.40)。

首先，由几何因子$(klin|jm)^*$可以定出矩阵元$\langle qjm|\hat{F}_l^{(k)}|pin\rangle$非零的必要条件：$(klin|jm)\neq 0$，这要求在$G$的表示$A^{(k)}\otimes A^{(i)}$中含有表示$A^{(j)}$。如果列标$l$、$n$、$m$等是$G$的子群$G_1$的不可约表示的标记，即力学量和态是按群链$G\supset G_1$分类的，则还要求在$G_1$的表示$A^{(l)}\otimes A^{(n)}$中含有表示$A^{(m)}$。例如，角动量的平方量子数$j$和投影量子数$m$分别为群$SO(3)$和$SO(2)$的不可约表示的标记，所以在(33.41)中的力学量和基矢（态）是按群链$SO(3)\supset SO(2)$来分类的。由$SO(3)$和$SO(2)$的C——G级数可知，在表示$(j_1)\otimes(j_2)$中含有(j_3)的条件是$|j_1-j_2|\leqslant j_3\leqslant j_1+j_2$，在表示$(m_1)\otimes(m_2)$中含有$(m_3)$的条件是$m_3=m_1+m_2$。所以矩阵元(33.41)不为零的必要条件是

$$\begin{cases}\Delta(j_1j_2j_3)\\ m_3=m_1+m_2\end{cases}\tag{33.42}$$

其中$\Delta(j_1j_2j_3)$表示j_1、j_2、j_3为某三角形的三个边长。(33.42)实际上是熟知的角动量耦合法则。在一般情形下，力学量和基矢可以按给定的群链$G_0\supset G_1\supset\cdots\supset G_r\supset\cdots$来分类$(G_0=G)$，这时$|pin\rangle$可记为$|pi,p_1i_1,\cdots,p_ri_r,\cdots\rangle$，$\hat{F}_l^{(k)}$可记为$\hat{F}(k,t_1k_1,\cdots,t_rk_r,\cdots)$，$|qjm\rangle$也有类似的记法，其中$i_r$、$k_r$是$G_r$的不可约表示$A_r$的指标，$p_r$、$t_r$分别为其重复指标。容易看出，这时矩阵元(33.40)不等于零的必要条件为

$$\begin{cases}A_r^{(k_r)}\otimes A_r^{(i_r)}\text{包含}A_r^{(j_r)}\\ r=0,1,\cdots\end{cases}\tag{33.43}$$

$(k_0=k,i_0=i,j_0=j)$。

其次，由几何因子还可以定出具有相同指标qj、k、pi的不同矩阵元的比值。由(33.40)有

$$\frac{\langle qjm|\hat{F}_{l}^{(k)}|pin\rangle}{\langle qjm'|\hat{F}_{l'}^{(k)}|pin'\rangle}=\frac{(klin|jm)^*}{(kl'in'|jm')^*} \tag{33.44}$$

$G=SO(3)$时，上式化为

$$\frac{\langle qj_3m_3|\hat{F}_{m_1}^{(j_1)}|pj_2m_2\rangle}{\langle qj_3m_3'|\hat{F}_{m_1'}^{(j_1)}|pj_2m_2'\rangle}=\frac{(j_1m_1j_2m_2|j_3m_3)}{(j_1m_1'j_2m_2'|j_3m_3')} \tag{33.45}$$

考虑哈密顿量为 $\hat{H}_0$ 的一个量子体系，设 $\hat{H}_0$ 的对称群为 G，则体系的定态可以按 G（G的子群链）的表示进行分类。设有微扰 $\hat{H}'$，它引起体系由一个态向其他定态的量子跃迁。在微扰的初级近似下，这个过程的几率正比于 $\hat{H}'$ 在始、末态下的矩阵元的模的平方。通常可将 $\hat{H}'$表为 G 的不可约张量算子的某种已知组合，于是$\hat{H}'$的矩阵元的计算便归结为不可约张量算子的矩阵元的计算，而这时出现在矩阵元中的算子和始、末态都是按G（G的子群链）的表示分类的。所以(33.43)相当于由 $\hat{F}_l^{(k)}$ 所激发的跃迁 $|pin\rangle\longrightarrow|qjm\rangle$ 的选择定则；而(33.44)的模的平方给出两种跃迁过程

$$|pin\rangle\xrightarrow{\hat{F}_l^{(k)}}|qjm\rangle \quad 与 \quad |pin'\rangle\xrightarrow{\hat{F}_{l'}^{(k)}}|qjm'\rangle$$

的几率（强度）之比，相当于强度定则。因而，通常也将(33.43)和(33.42)称为矩阵元的选择定则，将(33.44)和(33.45)称为矩阵元的强度定则。上面的结果表明：矩阵元的选择定则只由群G的子群链（态及力学量均按此链分类）的C——G级数决定；而矩阵元的强度定则则取决于G的C——G系数之比值。

例如，$O(3)$是原子中电子体系的对称群，因而原子中的电子态总可按 $O(3)$的不可约表示进行分类：$\{|p\sigma JM\rangle\}$。这实际上是按C_i和$SO(3)\supset SO(2)$的分类，σ是C_i的表示的记

号，J、M 分别为$SO(3)$和$SO(2)$的表示的记号(见(33.32)和(33.33))，其物理意义分别为体系的宇称、总角量子数与总磁量子数。另一方面，我们知道，体系的电 2^k 级矩和磁 2^k 级矩在$O(3)$的变换下分别为$(2k+1)$个分量的张量和膺张量，即分别按表示$D^{(k,1)}$和$D^{(k,0)}$变换，可写为$\hat{F}_l^{(k,1)}$和$\hat{F}_l^{(k,0)}$。这实际上是将多级矩算子按C_i和$SO(3)\supset SO(2)$分类，k和l分别为$SO(3)$和$SO(2)$的不可约表示的记号。群C_i、$SO(3)$、$SO(2)$的C——G级数都是已知的，由此可立即写出原子的电子态之间的多极跃迁的选择定则。对于电2^k级矩跃迁，有

$$\begin{cases}\Delta\sigma=\pm 1\\ \Delta J=k,k-1,\cdots,|J-k|-J\\ \Delta M=l=0,\pm 1,\cdots,\pm k\end{cases}\qquad(33.46)$$

对于磁 2^k 级矩跃迁

$$\begin{cases}\Delta\sigma=0\\ \Delta J=k,k-1,\cdots,|J-k|-J\\ \Delta M=l=0,\pm 1,\cdots,\pm k\end{cases}\qquad(33.47)$$

作为第二个例子，我们来考虑NH_3分子的电子态间跃迁的选择定则。点群 C_{3v} 是 NH_3 分子中电子体系的对称群，因而 NH_3 的电子态可按 C_{3v} 的不可约表示分类，实际上可按群链 $C_{3v}\supset C_3$ 分类。分别以 i 和m表示 C_{3v} 和 C_3 的不可约表示 $A^{(i)}$和$\gamma^{(m)}$的指标($i=1,2,3$；$m=0,\pm 1$)，并注意在每个 $A^{(i)}$ 中 $\gamma^{(m)}$ 的重复度不超过 1 (因而对m无须使用重复指标)，NH_3的电子态便可写为$|pim\rangle$。电子体系的电偶矩和磁偶矩在 $C_{3v}\supset C_3$ 下的变换性质分别与$\hat{r}$和$\hat{L}$的变换性质相同，这已在33.2节中给出。容易写出 C_{3v} 和C_3的C——G级数

$$A^{(1)}\otimes A^{(1)}=A^{(1)},A^{(1)}\otimes A^{(2)}=A^{(2)},A^{(1)}\otimes A^{(3)}=A^{(3)}$$

$$A^{(2)}\otimes A^{(2)}=A^{(1)},A^{(2)}\otimes A^{(3)}=A^{(3)}$$

$$A^{(3)}\otimes A^{(3)}=A^{(1)}\oplus A^{(2)}\oplus A^{(3)}$$

$$\gamma^{(0)}\otimes\gamma^{(0)}=\gamma^{(0)},\gamma^{(0)}\otimes\gamma^{(1)}=\gamma^{(1)},\gamma^{(0)}\otimes\gamma^{(-1)}=\gamma^{(-1)}$$

$$\gamma^{(1)}\otimes\gamma^{(1)}=\gamma^{(-1)},\gamma^{(1)}\otimes\gamma^{(-1)}=\gamma^{(0)}$$

$$\gamma^{(-1)}\otimes\gamma^{(-1)}=\gamma^{(1)}$$

由此可以推断，对于量子数$(i,m)=(1,0),(2,0),(3,1),(3,-1)$来说，有下列可能的电偶极跃迁

$$(1,0)\longrightarrow(1,0),(3,1),(3,-1)$$

$$(2,0)\longrightarrow(2,0),(3,1),(3,-1)$$

$$(3,1)\longrightarrow(3,1),(1,0),(2,0),(3,-1)$$

$$(3,-1)\longrightarrow(3,-1),(1,0),(2,0),(3,1)$$

同样地，有下列可能的磁偶极跃迁

$$(1,0)\longrightarrow(2,0),(3,1),(3,-1)$$

$$(2,0)\longrightarrow(1,0),(3,1),(3,-1)$$

$$(3,1)\longrightarrow(3,1),(1,0),(2,0),(3,-1)$$

$$(3,-1)\longrightarrow(3,-1),(1,0),(2,0),(3,1)$$

因此可将选择定则更简洁地表为如下形式。禁戒的电偶极跃迁为

$$(1,0)\leftarrow\!|\!\rightarrow(2,0)\tag{33.48}$$

禁戒的磁偶极跃迁为

$$(1,0)\leftarrow\!|\!\rightarrow(1,0)\text{和}(2,0)\leftarrow\!|\!\rightarrow(2,0)\tag{33.49}$$

（注意，量子数(i,m)相同的两个电子态$|pim\rangle$和$|p'im\rangle$可以不同）。

第七章　置换群的表示

置换群 S_n 是全同粒子体系的对称群，它刻画着体系的置换对称性。此外，置换群在群论中还具有一种特殊地位，任意 n 阶的有限群都同构于 S_n 的一个子群，在同构意义下，S_n 及其子群穷尽了全部 n 阶有限群；另一方面，S_n 的表示又与线性李群的表示有着密切联系，可借助于 S_n 的表示理论来处理线性李群的表示问题。所以 S_n 的表示理论在应用上和理论上都有其特殊的重要性。

前面我们已经在有限群表示论的一般基础上处理了一些低阶有限群（非 Abel 群）的表示，例如晶体点群的表示，其中已经包含了S_2、S_3、S_4的表示。显然，当 n 增大时，用那种方法来构造 S_n的表示是困难的。为了同时建立所有 S_n 的表示，形成了一套相当别致的特殊方法。本章中我们将比较系统地介绍这种方法。

这个理论的一个特点是，它的一些普遍结论可以用图形（杨图）的概念给以非常直观和简洁的表述，但这些结论的证明却比较麻烦。只对理论结果的应用有兴趣的读者，初读时不妨暂时略去所有的论证。

§34　杨(Young)图

34.1　台

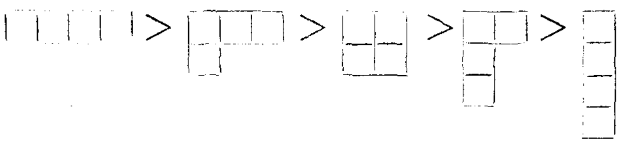
在 9.3 节的例 3 中已证明，置换群的类是由置换的循环结构决定的，具有相同循环结构的置换其集合是置换群的一个类。

它是由循环结构(ν)来标记的（见§5）。而由(5.9)—(5.12)又知，循环结构(ν)与自然数n的分割$[\lambda]$一一对应，因而也可将$[\lambda]$作为类的标记。另一方面，S_n的类数等于S_n的不可约表示的个数，(ν)或$[\lambda]$也有可能用来标记S_n的不可约表示（一一对应），后面将证明确实可以这样做。而且还将表明，用n的分割$[\lambda]$来标记S_n的不可表示是非常方便的。所以对(ν)和$[\lambda]$有如下分工：用(ν)标记S_n的类，用$[\lambda]$标记S_n的不可约表示。

在§5中引入了一种框图，用来表示分割$[\lambda]$。因而，S_n的每个不可约表示也可用一个n次（含有n个方格）框图来表示（一一对应），有多少个不同的n次框图（即n的不同分割），S_n就有多少个不可约表示。例如，只能画出三个3次框图（见5.3节），由此可知S_3有三个（不同的）不可约表示。这种框图也称为杨氏台，简称台。杨台以及下面要讲到的杨盘统称为杨图。为了建立S_n的表示理论，作为数学准备，我们先来研究杨图的一些性质。

在同次的台之间可以规定一种次序或“大小”。方法是比较台上各行的格数（第i行的格数即λ_i），从第一行比起，按最先出现的格数不等的行记数，格较多的算是较大的台，大小关系也可用符号$>$来表示。例如，所有4次台的次序应为

[4]　　[31]　　[22]　　[211]　　[1111]



一个n次台，通常也用它所对应的分割$[\lambda]=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n]$写出。

34.2 盘

把从1到n的几个自然数以任意的次序填到一个n次台的各格中去，就得到一张杨氏表，也称为属于那个n次台的一个杨盘，简称n次盘。因对给定的一个n次台，n个自然数有$n!$种不同的填法，所以属于同一个n次台的不同的盘共有$n!$个。

以$\Sigma^{[\lambda]}$表示属于台$[\lambda]$的一个盘，如将$\Sigma^{[\lambda]}$中的数码作一置换s（$s\in S_n$），则将得到属于$[\lambda]$的另一个盘$\Sigma_s^{[\lambda]}$，此事记作

$$s\Sigma^{[\lambda]}=\Sigma_s^{[\lambda]} \tag{34.1}$$

例如

$$(13)(24)\ \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4\\\cline{1-1}\end{array}=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 3&4&1\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}$$

由一个n次盘出发，经S_n的所有置换便可得出属于同一个台的全部盘。如果一个置换只置换盘$\Sigma^{[\lambda]}$的同一行中的数码（不改变每个数码所在的行数），则称为是$\Sigma^{[\lambda]}$的水平置换；类似地，只置换$\Sigma^{[\lambda]}$的同一列中的数码的置换称为$\Sigma^{[\lambda]}$的垂直置换。显然某一n次盘的水平置换的集合形成S_n的一个子群，称为这个盘的水平置换群；类似的，可定义一个盘的垂直置换群。例如，$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4\\\cline{1-1}\end{array}$的水平置换群是$S_4$的子群$\{(1),(123),(132),(12),(23),(13)\}\cong S_3$，垂直置换群是$S_4$的另一子群$\{(1),(14)\}$。

容易看出，如果p是$\Sigma^{[\lambda]}$的一个水平置换，则$sps^{-1}(s\in S_n)$是$s\Sigma^{[\lambda]}$的水平置换；对于垂直置换亦有类似的性质。事实上，在$\Sigma^{[\lambda]}$中被数码i所占的那个格，在$s\Sigma^{[\lambda]}$中被si所占，因而若i和j属于$\Sigma^{[\lambda]}$的同一行(列)，则si和sj便属于$s\Sigma^{[\lambda]}$的同一行（列）。若p将i变为j，则sps^{-1}显然将si变为sj，即sps^{-1}不改变si所在的行（列）。

定理 1 假定$[\lambda]$和$[\lambda']$是两个n次台，$\Sigma^{[\lambda]}$和$\Delta^{[\lambda']}$分

别是属于这两个台的盘，若$[\lambda]\geqslant[\lambda']$，且在$\Sigma^{[\lambda]}$中同行的数码在$\Delta^{[\lambda']}$中不同列，则$[\lambda]=[\lambda']$，并存在$\Sigma^{[\lambda]}$的水平置换$p$和垂直置换$q$，使$pq\Sigma^{[\lambda]}=\Delta^{[\lambda]}$。

证明 $[\lambda]\geqslant[\lambda']$蕴含$\lambda_1\geqslant\lambda_1'$，而$\lambda_1$和$\lambda_1'$分别等于$\Sigma^{[\lambda]}$的第一行中的数码数和$\Delta^{[\lambda']}$的第一行中的数码数。按假设条件，$\Sigma^{[\lambda]}$第一行中的这$\lambda_1$个数码在$\Delta^{[\lambda']}$的不同列中，这要求$\Delta^{[\lambda']}$的列数$\lambda_1'\geqslant\lambda_1$。从而得$\lambda_1=\lambda_1'$；且有$\Delta^{[\lambda']}$的垂直置换$q_1'$，将处于$\Sigma^{[\lambda]}$的第一行中的数码变到$q_1'\Delta^{[\lambda']}$的第一行，因而$\Sigma^{[\lambda]}$的第一行与$q_1'\Delta^{[\lambda']}$的第一行含有相同的数码。

再考虑盘$\Sigma^{[\lambda]}$和$q_1'\Delta^{[\lambda']}$。在$\Sigma^{[\lambda]}$的第二行中的λ_2个数码在$\Delta^{[\lambda']}$的不同列，从而也在$q_1'\Delta^{[\lambda']}$的不同列，但不能出现在$q_1'\Delta^{[\lambda']}$的第一行中。这要求$\lambda_2\leqslant\lambda_2'$。但在$\lambda_1=\lambda_1'$的条件下，$[\lambda]\geqslant[\lambda']$蕴含$\lambda_2\geqslant\lambda_2'$，故必有$\lambda_2=\lambda_2'$。此外，可以通过$q_1'\Delta^{[\lambda']}$的一个垂直置换$q_2'$，使处于$q_1'\Delta^{[\lambda']}$的不同列上的那$\lambda_2=\lambda_2'$个数码全部进入第二行，而$q_2'$不变动第一行中的数码。从而，$\Sigma^{[\lambda]}$与$q_2'q_1'\Delta^{[\lambda']}$的前两行分别含有相同的数码。

如此继续下去，将逐次得出：$\lambda_3=\lambda_3'$，…，$\lambda_n=\lambda_n'$，总之有$[\lambda]=[\lambda']$。同时得知，有置换$q'=q_n'\cdots q_2'q_1'$（当$r\geqslant[\lambda]$的行数时，q_r'表示恒等置换），使$q'\Delta^{[\lambda]}$与$\Sigma^{[\lambda]}$的对应行中含有相同的数码。显然，q'不会改变$\Delta^{[\lambda]}$中的数码所在的列，因而它是$\Delta^{[\lambda]}$的垂直置换。现在可以通过置换$\Sigma^{[\lambda]}$每行中的数码，使$\Sigma^{[\lambda]}$变成$q'\Delta^{[\lambda]}$，即有$\Sigma^{[\lambda]}$的水平置换p，使$p\Sigma^{[\lambda]}=q'\Delta^{[\lambda]}$。注意到$q'\Delta^{[\lambda]}$与$\Delta^{[\lambda]}$的列含有相同的数码，便可看出，$\Delta^{[\lambda]}$的垂直置换$q'$也是$q'\Delta^{[\lambda]}=p\Sigma^{[\lambda]}$的垂直置换。从而$(q')^{-1}$也是$p\Sigma^{[\lambda]}$的垂直置换。由此推知，$q=p^{-1}(q')^{-1}p$是$\Sigma^{[\lambda]}=p^{-1}(p\Sigma^{[\lambda]})$

的垂直置换。将 $(q')^{-1}=pqp^{-1}$ 代入 $\Delta^{[\lambda]}=(q')^{-1}p\Sigma^{[\lambda]}$，便得 $\Delta^{[\lambda]}=pq\Sigma^{[\lambda]}$，$p$ 和 q 分别是 $\Sigma^{[\lambda]}$ 的水平置换和垂直置换。

34.3 标准盘

在一个盘中，如果每一行的数码由左到右都是递增的，每一列的数码由上到下都是递增的，则这样的盘称为是标准盘。在标准盘中，数码 1 只能处于第一行第一列的格中，数码 2 只能处于一行二列或二行一列的格中，数码 3 只能处于与 1 或 2 相邻（右方和下方）的格中，其余类推，最后的数码 n 只能处于其所在行的最右边及所在列的最下边。当 n 不大时，容易写出给定 n 次台的所有标准盘。例如，4 次台 $\begin{array}{|c|c|c|}\hline \ & \ & \ \\ \hline \ \\ \cline{1-1}\end{array}$ 的全部标准盘为 $\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\ \hline 4\\ \cline{1-1}\end{array}$，$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\ \hline 3\\ \cline{1-1}\end{array}$，$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\ \hline 2\\ \cline{1-1}\end{array}$。后面将证明，由一个台所标记的不可约表示的维数等于这个台的标准盘的个数，并能用这些标准盘来标记这个表示的不可约基。例如由上面的例子可知，S_4 的不可约表示[31]是 3 维的，其 3 个基矢可由三个标准盘标记。

为了确定一个标准盘，只需指出各个行中所含的数码，因为同一列中数码的次序（由左向右）是由这些数码本身决定的（由小到大）。所以，有一种书写标准盘的有用的记法，就是指明每个数码所在的行数(同于指明了各行中所含的数码)。用 $r_1, r_2, \cdots, r_n$ 分别表示数码 $1, 2, \cdots, n$ 所在的行数，则这个标准盘可记为 $(r_n r_{n-1}\cdots r_1)$。这种记号称为山内恭彦(Yamanouchi)符号，或 Y 符号。例如，[31]的三个标准盘（或基矢）的 Y 符号为(2111)，(1211)，(1121)。

取定一个 n 次台 $[\lambda]$，考虑这个台的标准盘的数目 d。将台 $[\lambda]$ 第 t 行的最右边的格去掉，当 $\lambda_t>\lambda_{t+1}$ 时，得到一个 $(n-1)$ 次台，记作 $[\lambda]_{(t)}$，其标准盘的个数记作 $d_{(t)}$；当 $\lambda_t=$

λ_{t+1}时，$[\lambda]_{(t)}$不存在，这时定义$d_{(t)}=0$。同样地，用$[\lambda]^{(s)}$表示在$[\lambda]$的第s行的右边加上一格后所得的$(n+1)$台，其标准盘数记作$d^{(s)}$，当$[\lambda]^{(s)}$不存在时$(\lambda_{s-1}=\lambda_s)$，$d^{(s)}=0$.显然，当$d_{(t)}\neq 0$且$d^{(s)}\neq 0$时，有$(d_{(t)})^{(s)}=(d^{(s)})_{(t)}$，可简记作$d\{{s \atop t}\}$；当$d_{(t)}=0$或$d^{(s)}=0$时，定义$d\{{s \atop t}\}=0$.

在$[\lambda]$的标准盘中，数码n位于第t行的盘数显然等于$d_{(t)}$（注意n总在t行的右边）。将$d_{(t)}$对t求和，便得到$[\lambda]$的标准盘的总数

$$d=\sum_{t=1}^{h} d_{(t)} \tag{34.2}$$

其中h为$[\lambda]$的行数。这个结果可用来计算任意台的标准盘的个数。例如

$$\begin{aligned} d[32] &= d[22]+d[31] \\ &= d[21]+d[21]+d[3] \\ &= 2d[11]+2d[2]+d[3] \\ &= 2+2+1=5 \end{aligned}$$

（$d[22]_{(1)}=0$，不必写出）。

(34.2)式用由$[\lambda]$产生的一切$(n-1)$次台的标准盘数来表示$[\lambda]$本身的标准盘数。类似地，$[\lambda]$的标准盘数也能用由$[\lambda]$生成的所有$(n+1)$次台的标准盘数来表示。即有

$$(n+1)d=\sum_{s=1}^{h+1} d^{(s)} \tag{34.3}$$

此式可用归纳法证明。

$n=1$时，$[\lambda]=\square$，$[\lambda]^{(1)}=\square\square$，$[\lambda]^{(2)}=\begin{array}{|c|}\hline \ \\ \hline \ \\ \hline\end{array}$，可见$d=1$，$d^{(1)}=1$，$d^{(2)}=1$，(34.3)显然成立。

假定(34.3)对$(n-1)$次台成立，便有

$$nd_{(t)}=\sum_{s=1}^{h+1} d\{{s \atop t}\},\quad t=1,2,\cdots,h$$

但由(34.2)有（对$(n+1)$次台$[\lambda]^{(s)}$）

$$d^{(s)}=\sum_{t=1}^{h} d_{(t)}^{(s)},\quad s=1,2,\cdots h$$

代入(34.3)的右边得

$$\begin{aligned}\sum_{s=1}^{h+1} d^{(s)}&=d^{(h+1)}+\sum_{s=1}^{h}\sum_{t=1}^{h} d_{(t)}^{(s)}\\&=d^{(h+1)}+\sum_{t=1}^{h}(nd_{(t)}-d_{(t)}^{(h+1)})\\&=d^{(h+1)}+n\sum_{t=1}^{h} d_{(t)}-\sum_{t=1}^{h} d_{(t)}^{(h+1)}\end{aligned}$$

将(34.2) 用于台 $[\lambda]^{(h+1)}$，有

$$d^{(h+1)}=\sum_{t=1}^{h+1} d_{(t)}^{(h+1)}=d_{(h+1)}^{(h+1)}+\sum_{t=1}^{h} d_{(t)}^{(h+1)}$$

代入上式得

$$\sum_{s=1}^{h+1} d^{(s)}=d_{(h+1)}^{(h+1)}+n\sum_{t=1}^{h} d_{(t)}$$

显然有$[\lambda]_{(h+1)}^{(h+1)}=[\lambda]$，从而 $d_{(h+1)}^{(h+1)}=d$，而$\sum_{t=1}^{h} d_{(t)}=$
上式可化为

$$\sum_{s=1}^{h+1} d^{(s)}=(n+1)d$$

可见(34.3)对 n 次台$[\lambda]$成立。

定理 2 所有 n 次台的标准盘数的平方和等于n

证明 对台的次数 n 采用归纳法。当$n=1$时，定
立。假定定理对于 n 成立，证它对于$(n+1)$也成立。

为简单计，对 n 次台和$(n+1)$次台都给以次序标
i 和i' 表示，第 i 个 n 次台的标准盘数记作d_i，第i'个
台的标准盘数记作 $d_{i'}'$。由第 i 个 n 次台出发，通过
的右边加上一个格的方式，可以产生一部分 $(n+$
之，每个$(n+1)$次台都能由一部分n次台这样地产
这种产生关系（只在某一行上差一个格）的 n 次台

]用 $i\sim i'$ 来表示，并作和 $\sum\limits_{i\sim i'} d_i d'_{i'}$。

(用两种求和次序来计算上面的和式。如果先对 i' 求

（应用(34.3)）

$$\sum_{i\sim i'} d_i d'_{i'} = \sum_i d_i \sum_{i\sim i'} d'_{i'} = \sum_i d_i (n+1) d_i$$
$$= (n+1)\sum_i d_i^2$$

i 求和，并应用(34.2)，又有

$$\sum_{i\sim i'} d_i d'_{i'} = \sum_{i'} d_{i'} \sum_{i\sim i'} d_i = \sum_{i'} d'_{i'} \cdot d'_{i'} = \sum_{i'} (d'_{i'})^2$$

$$\sum_{i'} (d'_{i'})^2 = (n+1)\sum_i d_i^2$$

理对于 n 次台成立，就有

$$\sum_i d_i^2 = n!$$

得

$$\sum_{i'} (d'_{i'})^2 = (n+1)\cdot n! = (n+1)!$$

对 $(n+1)$ 次台也成立。从而定理 2 得证。

台的记号 $[\lambda]$，并将 $[\lambda]$ 的标准盘数记作 $n[\lambda]$，定理

为

$$\sum_{[\lambda]} n^2[\lambda] = n! \qquad (34.4)$$

对所有 n 次台求和。

到 $n!$ 是群 S_n 的阶，而 $n[\lambda]$ 等于表示 $[\lambda]$ 的维数（待

(34.4)表明了不可约表示的维数平方和等于群的阶这

实。

以 4 次台为例来验证定理 2：

$n[4] = 1$

$n[31] = n[21] + n[3] = n[11] + n[2] + n[3] = 3$

$n[22]=n[21]=n[11]+n[2]=2$

$n[211]=n[111]+n[21]=n[111]+n[11]+n[2]=3$

$n[1111]=1$

$1^2+3^2+2^4+3^2+1^2=24=4!$

在同一个台的标准盘之间，也能够建立一种确定的次序（大小）：从第一行起，由左向右，逐次比较每个格中的数码，首先出现较大数码的标准盘算是较大的。标准盘之间的大小(次序)关系也用符号“<”来表示。例如，前面写过的[31]的三个标准盘有如下次序

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4\\\cline{1-1}\end{array}<\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}<\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}$$

定理 3 假定Σ和Δ是属于同一台的两个标准盘，在Σ中同行的数码在Δ中不同列，则有$\Sigma\geqslant\Delta$。

证明 用反证法，只需证明：若$\Sigma<\Delta$，则至少有两个数码在Σ的同一行且在Δ的同一列。证明的方法是，在$\Sigma<\Delta$的条件下，我们设法找出两个数码，它们确实在Σ的同一行且在Δ的同一列。

$\Sigma<\Delta$表明，在它们所属的台中有一个格子(ik)（表第i行第k列的格子），Σ和Δ在这个格前面的每个格（图34.1中用粗线围起的部分）中的数码都相同，且Σ在(ik)中的数码m小于Δ在(ik)中的数码q。现在考虑数码m在Δ中的位置。因$m<q$，按标准盘的定义，在Δ中，m不可能在q的右下方（图34.1中用虚线围起的部分）；另一方面，在Δ中m也不能在粗线围起的部分（否则m在Σ中将位于这部分，这与m位于(ik)矛盾）。所以，在Δ中，m必位于上述两部分之外的某一格子(lj)中（见图），$l>i$，$j<k$。再考虑第i行第j列的格子(ij)，由于(ij)在(ik)的前边$(j<k)$，即在粗线包围的部分内，因而Σ和Δ在(ij)中的数码是相同的，设为m'。

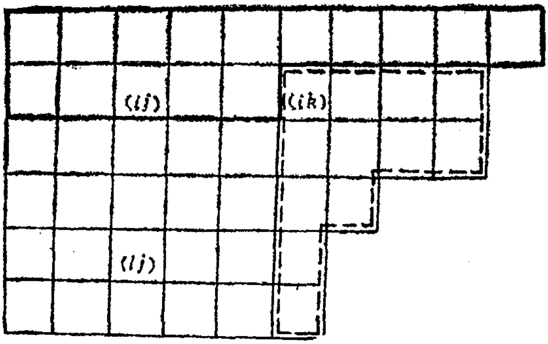


图 34.1

m和m'就是我们要找的两个数码：在Σ中，它们分别在格子(ik)和(ij)中，都位于Σ的第i行；在Δ中，它们分别在格子(lj)和(ij)中，都位于Δ的第j列。从而定理得证。

利用本节中的三个定理所概括的关于杨图的性质，不难建立起置换群的不可约表示的基本理论。这正是我们事先陈述这些预备知识的目的。

§ 35 杨算子与S_n的不可约表示

35.1 S_n的群代数与杨算子

在§16中已经指出，有限群G的群代数形成G的正则表示空间。由于正则表示含有群的所有不可约成分，如能将群代数分解成最小左不变子代数（最小左理想）的直和，就等于实现了正则表示的完全约化，从而得到群的全部不可约表示。事实上群代数的每一个最小左不变子代数，就是G的一个不可约表示空间。问题是如何作出最小左不变子代数（作为正则表示的不可约子空间），来得出G的不可约表示。

以$\mathscr{R}$表示G的群代数，$v_0\in\mathscr{R}$，考虑$\mathscr{R}$的子集$\mathscr{R}v_0=\{vv_0:$

$v\in\mathscr{R}\}$。容易验证，$\mathscr{R}v_0$是$\mathscr{R}$的一个子代数（$a_1v_1v_0+a_2v_2v_0=(a_1v_1+a_2v_2)v_0=vv_0\in\mathscr{R}v_0$，表明 $\mathscr{R}v_0$ 是$\mathscr{R}$的子空间；$(v_1v_0)(v_2v_0)=(v_1v_0v_2)v_0=v'v_0\in\mathscr{R}v$。又进而表明 $\mathscr{R}v_0$ 是$\mathscr{R}$的子代数），这个子代数是左不变的：$u(vv_0)=(uv)v_0=wv_0\in\mathscr{R}v_0$，$u\in\mathscr{R}$。总之，用$\mathscr{R}$的任意元右乘$\mathscr{R}$，总是生成$\mathscr{R}$的一个左不变的子代数（即$G$的正则表示的一个不变子空间）。如果$\mathscr{R}v_0$又是最小的（作为表示空间是不可约的），我们便得到了一个不可约表示。

寻求G的不可约表示的问题，现在可转为寻找$\mathscr{R}$中的特殊元v_0，使得$\mathscr{R}v_0$是$\mathscr{R}$的最小左不变子代数。为了得到全部不可约表示，就需作出产生不同（不等价的）不可约表示的所有v_0。

对于置换群来说，下面要引入的杨算子就是 S_n 的群代数中的具有上述性质的特殊元。以下$\mathscr{R}$专指 S_n 的群代数。

由每一个 n 次盘Σ可定义一个$\mathscr{R}$的非零元Y_Σ，称为由Σ产生的杨算子

$$Y_\Sigma=(\sum_p p)(\sum_q\delta_q q)=\sum_{pq}\delta_q pq \qquad (35.1)$$

其中 p 是Σ的水平置换，$\sum p$ 是所有水平置换的和，q 是Σ的垂直置换，$\delta_q=1$（当 q 是偶置换）或 -1（当 q 是奇置换），$\sum\delta_q q$是对所有垂直置换求和。$Y_\Sigma\neq 0$，这是因为：$Y_\Sigma=\sum_{pq}\delta_q pq$中群单位元 e 的系数为$1\neq 0$（注意水平置换与垂直置换不可能互逆，除非 $p=q=e$）。

台$[\lambda]$上有$n[\lambda]$个标准盘，对这些标准盘可给以由小到大的序号 $1,2,\cdots,m,\cdots,n[\lambda]$，用$\Sigma_m^{[\lambda]}$表$[\lambda]$的第$m$个标准盘，$\Sigma_m^{[\lambda]}$产生的杨算子记作$Y_m^{[\lambda]}$。

例 1 $\Sigma^{[n]}=\boxed{1\,|\,2\,|\quad\ \,|\,n}$，$Y^{[n]}=\sum\limits_{p\in S_n}p$。$Y^{[n]}$也称为对称化算子。

例 2 $\Sigma^{[1^n]}=\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline \vdots\\\hline n\\\hline\end{array}$，$Y^{[1^n]}=\sum\limits_{q\in S_n}\delta_q q$。$Y^{[1^n]}$也叫反称化算子。

例 3 $\Sigma_1^{[31]}=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4&&\\\hline\end{array}$，$Y_1^{[31]}=[(1)+(123)+(132)+(12)+(23)+(13)][(1)-(14)]=(1)+(123)+(132)+(12)+(23)+(13)-(14)-(1423)-(1432)-(142)-(14)(23)-(143)$。$Y_1^{[31]}$是$S_4$的群代数的一个特殊元。$S_4$的群代数的自然基是$S_4$的24个置换，群代数中的任意元都是这24个基矢的线性组合，$Y_1^{[31]}$是一个特定的组合，已在上面具体写出。

为了用Y算子分解S_n的群代数$\mathscr{R}$（即约化S_n的正则表示），需先证明Y算子的几个重要性质。

1° 若Y和Y'是由属于同一台的两个盘产生的，则有$s\in S_n$，使$Y'=sYs^{-1}$。

证明 设Y和Y'分别由盘Δ和Δ'产生成。因Δ'和Δ是同一个台的两个盘，故有$s\in S_n$，使

$$\Delta'=s\Delta \tag{35.2}$$

因而，若p和q是Δ的水平置换和垂直置换，则$p'=sps^{-1}$和$q'=sqs^{-1}$分别是Δ'的水平置换和垂直置换；反之亦然。从而Δ'的水平置换和与垂直置换和可写为

$$\sum p'=s\left(\sum p\right)s^{-1} \tag{35.3}$$

$$\sum\delta_{q'}q'=s\left(\sum\delta_q q\right)s^{-1} \tag{35.4}$$

（sqs^{-1}与q有相同的奇偶性$\Longrightarrow\delta_{q'}=\delta_q$）。将以上二式相乘，得

$$(\sum p')(\sum \delta_{q'} q') = s(\sum p)(\sum \delta_q q)s^{-1}$$

此即

$$Y' = sYs^{-1} \tag{35.5}$$

2° $Y^2 = \alpha Y$，α 为正整数，且 $\alpha \cdot d = n!$，d 是$\mathscr{R}Y$的维数。

证明 设产生Y的盘为Δ，Δ的水平置换的和$(\sum p)$及垂直置换的和$(\sum \delta_q q)$显然有如下性质：对Δ的任意水平置换p和垂直置换q

$$p(\sum p) = (\sum p)p = (\sum p) \tag{35.6}$$

$$q(\sum \delta_q q) = (\sum \delta_q q)q = \delta_q(\sum \delta_q q) \tag{35.7}$$

这是因为Δ的水平置换集和垂直置换集都是S_n的子群，对$(\sum p)$左(或右)乘p，只是相当于改变求和的次序；对$(\sum \delta_q q)$左（或右）乘q，除改变求和次序之外，当q为奇置换时还改变各项的奇偶性。从而$Y^2 = (\sum p)(\sum \delta_q q)(\sum p)(\sum \delta_q q)$满足

$$pY^2 q = \delta_q Y^2 \tag{35.8}$$

又，可以证明，若$\mathscr{R}$的任意元v满足

$$pvq = \delta_q v \tag{35.9}$$

对Δ的所有p和q成立，则必有

$$v = \gamma Y, \quad \gamma \text{是常数（与} v \text{有关）} \tag{35.10}$$

所以，(35.8)蕴含$Y^2 = \alpha Y$。

下面来证明(35.9)$\Longrightarrow$(35.10)。将v向$\mathscr{R}$的自然基$\{s\}$展开

$$v = \sum_s \gamma_s s \tag{35.11}$$

代入(35.9)得

$$\sum_s \gamma_s psq = \sum_s \gamma_s \delta_q s \tag{35.12}$$

置换s（S_n的元）可分为两种类型：pq型的和非pq型的（p、q是对Δ而言）。在(35.12)的右边，$s = pq$的项是$\delta_q \gamma_{pq} pq$，

左边的pq项是$s=e$（e表S_n的单位元）的项$\gamma_e pq$，比较此二项的系数得

$$\gamma_{pq}=\delta_q\gamma_e \tag{35.13}$$

这就确定了(35.11)中pq型置换的系数。若s_0为一非pq型置换，则对任意的p、q有

$$s_0\Delta\neq pq\Delta \tag{35.14}$$

盘Δ和$s_0\Delta$显然属于同一个台，满足上节中定理1的条件$[\lambda]\geqslant[\lambda']$，因而若$\Delta$中同行的数码在$s_0\Delta$中不同列，则必有$p$、$q$，使$pq\Delta=s_0\Delta$。所以，(35.14)表明，至少有两个数码$i$和$j$，它们在$\Delta$中同行且在$s_0\Delta$中同列。令$t=(ij)$，则$t$是$\Delta$的水平置换并是$s_0\Delta$的垂直置换，而$t'=s_0^{-1}ts_0$则是$s_0^{-1}(s_0\Delta)=\Delta$的垂直置换。即，$t$和$t'$分别是$\Delta$的$p$型置换和$q$型置换。在(35.12)中，取$p=t$，$q=t'$，并注意$ps_0q=ts_0t'=ts_0s_0^{-1}ts_0=t^2s_0=s_0$及$\delta_q=\delta_{t'}=-1$，再比较等式两边$s_0$的系数，得$\gamma_{s_0}=-\gamma_{s_0}$，即有

$$\gamma_{s_0}=0 \tag{35.15}$$

这表明，在(35.11)中不含有非pq型的项。所以可写

$$v=\sum_{pq}\gamma_{pq}pq=\gamma_e\sum_{pq}\delta_q pq=\gamma_e Y \tag{35.16}$$

此即(35.10)。这就证明了（令$a=\gamma_e$）

$$Y^2=aY \tag{35.17}$$

注意a是$v=Y^2$中所含的单位元的系数，它必为整数。实际上，Y是自然基的整系数组合，Y^2自然也是这样。

最后来证明a等于$\mathscr{R}$的维数与$\mathscr{R}Y$的维数之比

$$a=\frac{n!}{d} \tag{35.18}$$

考虑$\mathscr{R}$上的线性算子$\mathfrak{p}$

$$\mathfrak{p}v=vY,\quad v\in\mathscr{R} \tag{35.19}$$

(p将空间$\mathscr{R}$投影为子空间$\mathscr{R}Y$)。先在$\mathscr{R}$中取自然基$\{s_1, s_2, \cdots, s_{n!}\}$，用$p$作用于$s_i$，有

$$ps_i = s_iY = \sum_{pq}\delta_q s_i pq = s_i + \cdots$$

(当$pq \neq e$时，$s_ipq \neq s_i$，故s_i的系数为1)可见p的迹为

$$\mathrm{tr}p = \sum_{i=1}^{n!} p_{ii} = \sum_{i=1}^{n!} 1 = n! \qquad (35.20)$$

再在$\mathscr{R}$中另取一组基$\{v_1, v_2, \cdots, v_d, v_{d+1}, \cdots\}$，其中前$d$个取为子代数$\mathscr{R}Y$的基，后面的可任取。将$p$作用于$v_i$，因$i \leqslant d$时$v_i \in \mathscr{R}Y$故可写$v_i = uY$，从而$pv_i = v_iY = uY^2 = \alpha uY$，即

$$pv_i = \alpha v_i, \qquad i = 1, 2, \cdots, d$$

当$j > d$时，$pv_j = v_jY \in \mathscr{R}Y$，故$pv_i$可写为$\mathscr{R}Y$的基的线性组合

$$pv_j = p_{1j}v_1 + p_{2j}v_2 + \cdots + p_{dj}v_d, \qquad j > d$$

可见$p_{jj} = 0$。从而又有

$$\mathrm{tr}p = \sum_{i=1}^{d} p_{ii} + \sum_{j=d+1}^{n!} p_{jj} = \sum_{i=1}^{d}\alpha + 0 = \alpha \cdot d \qquad (35.21)$$

比较(35.20)和(35.21)，便得

$$\alpha \cdot d = n!$$

此即(35.18)。这也表明$\alpha > 0$，所以α是正整数。

2°的推论　$\mathscr{R}Y$的维数整除$\mathscr{R}$的维数。

3°　对$\mathscr{R}$的任意元v，有$YvY = \gamma Y$，γ是常数(与v有关)。

证明　$YvY = (\sum p)[(\sum \delta_q q)v(\sum p)](\sum \delta_q q)$，由(35.6)和(35.7)知：$YvY$满足条件(35.9)

$$p(YvY)q = \delta_q(YvY) \qquad (35.22)$$

由(35.10)知，上式蕴含

$$YvY = \gamma Y \qquad (35.23)$$

其中γ为YvY对自然基的展开式中单位元e的系数。

4° 若Y和Y'是由属于不同台的两个盘产生的，则对$\mathscr{R}$的任意元v有：$YvY'=0$，$Y'vY=0$。

证明 设产生Y和Y'的盘分别为Δ和Δ'，假定Δ的台是较大的。这时相当于上节定理1的条件$[\lambda]\geqslant[\lambda']$成立，但$[\lambda]\neq[\lambda']$，因而至少有两个数码$i$和$j$在$\Delta$的同一行和$\Delta'$的同列。令$t=(i,\ j)$，则$t$同时为$\Delta$的$p$型置换和$\Delta'$的$q'$型置换。由(35.6)和(35.7)得

$$\begin{aligned}(\sum p)t(\sum\delta_{q'}q')&=[(\sum p)t](\sum\delta_{q'}q')\\&=(\sum p)(\sum\delta_{q'}q')=(\sum p)[t(\sum\delta_{q'}q')]\\&=\delta_t(\sum p)(\sum\delta_{q'}q')=-(\sum p)(\sum\delta_{q'}q')\end{aligned}$$

从而有

$$(\sum p)(\sum\delta_{q'}q')=0 \tag{35.24}$$

同理可证

$$(\sum\delta_{q'}q')(\sum p)=0 \tag{35.25}$$

用置换s作用于Δ'，得出属于同一台的盘$\Delta''=s\Delta'$。这时由(35.4)知，Δ''的垂直置换和为

$$\sum\delta_{q''}q''=s(\sum\delta_{q'}q')s^{-1}$$

将(35.24)用于Δ和Δ''，得

$$(\sum p)(\sum\delta_{q''}q'')=(\sum p)s(\sum\delta_{q'}q')s^{-1}=0$$

两边右乘s，又有

$$(\sum p)s(\sum\delta_{q'}q')=0,\quad s\in G$$

因此，对$\mathscr{R}$中的任意元$v=\sum\limits_{s}\gamma_s s$，都有

$$(\sum p)v(\sum\delta_{q'}q')=0 \tag{35.26}$$

同理可由(32.25)推断

$$(\sum\delta_{q'}q')v(\sum p)=0 \tag{35.27}$$

对(35.27)左乘$(\sum p')$，右乘$(\sum\delta_q q)$，便得

$$Y'vY=0 \tag{35.28}$$

注意到 $YvY'=(\sum p)(\sum\delta_q q)v(\sum p')(\sum\delta_{q'}q')$

$$=(\sum p)v'(\sum\delta_{q'}q')$$

由(35.26)又得 $YvY'=0$ (35.29)

5° 若Y和Y'是由同一个台的两个标准盘产生的，且产生Y的标准盘较大，则有$YY'=0$。

证明 设产生Y和Y'的标准盘分别为Δ和Δ'，则有$\Delta>\Delta'$. 按上节的定理3，这要求：至少有两个数码i和j在Δ'中同行且在Δ中同列。所以$t=(ij)$是Δ'的p'型置换及Δ的q型置换。由(35.6)和(35.7)，有

$$(\sum\delta_q q)t(\sum p')=(\sum\delta_q q)[t(\sum p')]$$
$$=(\sum\delta_q q)(\sum p')=[(\sum\delta_q q)t](\sum p')$$
$$=-(\sum\delta_q q)(\sum p')$$

所以必须

$$(\sum\delta_q q)(\sum p')=0 \tag{35.30}$$

对上式左乘$(\sum p)$，右乘$(\sum\delta_{q'}q')$，得

$$YY'=0 \tag{35.31}$$

35.2 群代数$\mathscr{R}$的分解与S_n的不可约表示

$\mathscr{R}$是S_n的正则表示空间，$\mathscr{R}$的每个最小左不变子代数是这个(左)正则表示的一个不可约不变子空间，并生成S_n的一个不可约表示。所有的不可约表示空间都可以用杨算子右乘$\mathscr{R}$得出。

(1) 基本定理

定理 1° $\mathscr{R}Y$是不可约的；2° 若Y和Y'由同一个台的两个盘产生，则$\mathscr{R}Y$与$\mathscr{R}Y'$等价；3° 若Y和Y'由属于两个不同台的盘产生，则$\mathscr{R}Y$和$\mathscr{R}Y'$互不等价；4° 若$Y_1^{[\lambda]},Y_2^{[\lambda]},\cdots,Y_{n[\lambda]}^{[\lambda]}$为$[\lambda]$的标准盘所产生的杨算子，则$\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]},\mathscr{R}Y_2^{[\lambda]},\cdots,\mathscr{R}Y_{n[\lambda]}^{[\lambda]}$是线性无关的；5° 设$\Delta_m^{[\lambda]}$为$[\lambda]$的第$m$个标准盘，$\Delta_m^{[\lambda]}=h_m\Delta_1^{[\lambda]},h_m\in S_n,\Delta_m^{[\lambda]}$产生的杨算子为$Y_m^{[\lambda]}$，则$\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]}$的元

$h_1 Y_1^{[\lambda]}, h_2 Y_1^{[\lambda]}, \cdots, h_{n[\lambda]} Y_1^{[\lambda]}$形成$\mathscr{R} Y_1^{[\lambda]}$的基。

下面依次证明之。

证明 1° 若$\mathscr{R}Y$能分解为$\mathscr{R}$的两个不变（以下均指左不变）子代数的直和

$$\mathscr{R}Y = \mathscr{R}_1 \oplus \mathscr{R}_2 \tag{35.32}$$

则可证明，必有$\mathscr{R}Y = \mathscr{R}_1$或$\mathscr{R}Y = \mathscr{R}_2$。因而$\mathscr{R}Y$作为$S_n$的正则表示的不变子空间，是不可约的。

(35.32)表明，$\mathscr{R}Y$中的任何元均可唯一地分解为在$\mathscr{R}_1$和$\mathscr{R}_2$中的两个分量之和。特别地有分解式

$$Y = Y_1 + Y_2, \quad Y_1 \in \mathscr{R}_1, \quad Y_2 \in \mathscr{R}_2 \tag{35.33}$$

$Y_1 \in \mathscr{R}Y$，故可写$Y_1 = vY$，由杨算子的性质2°，有$Y_1 Y = vY^2 = \alpha v Y = \alpha Y_1$。从而，以$Y_1$左乘(35.33)得出

$$\alpha Y_1 = Y_1^2 + Y_1 Y_2$$

但$\alpha Y_1 \in \mathscr{R}_1$，而$Y_1 Y_2 \in \mathscr{R}_2$（注意$Y_2 \in \mathscr{R}_2$，而$\mathscr{R}_2$在$\mathscr{R}$下是不变的），由分解的唯一性，必有

$$Y_1^2 = \alpha Y_1 \tag{35.34}$$

$$Y_1 Y_2 = 0 \tag{35.35}$$

同样可证

$$Y_2^2 = \alpha Y_2 \tag{35.36}$$

$$Y_2 Y_1 = 0 \tag{35.37}$$

由(35.33)—(35.37)可得

$$Y Y_1 Y = \alpha^2 Y_1$$

又由杨算子的性质3°可得

$$Y Y_1 Y = \gamma Y = \gamma Y_1 + \gamma Y_2$$

比较以上二式，并注意YY_1Y分解的唯一性，最后得到

$$\begin{cases} \gamma Y_1 = \alpha^2 Y_1 \\ \gamma Y_2 = 0 \end{cases} \tag{35.38}$$

因 $\alpha \neq 0$，易见上式蕴含

$$\begin{cases} Y_1=0, & \text{当}\gamma=0 \\ Y_2=0, & \text{当}\gamma\neq 0 \end{cases} \tag{35.39}$$

总之，Y_1和Y_2之中必有一个为零。若$Y_1=0$，则$\mathscr{R}Y=\mathscr{R}Y_2\subset\mathscr{R}_2$（$\mathscr{R}_2$在$\mathscr{R}$下不变），但$\mathscr{R}_2\subset\mathscr{R}Y$（按定义(35.32)），所以$\mathscr{R}Y=\mathscr{R}_2$。同理，若$Y_2=0$，则$\mathscr{R}Y=\mathscr{R}_1$。因而，总有

$$\mathscr{R}Y=\mathscr{R}_1\text{或}\mathscr{R}_2 \tag{35.40}$$

这就证明了$\mathscr{R}Y$的不可约性。

2° 设产生Y和Y'的盘分别为Δ和Δ'，因Δ和Δ'属于同一个台，由杨算子的性质1°知，有$s\in S_n$，使($s\Delta=\Delta'$)

$$Y'=sYs^{-1} \tag{35.5}$$

为了证明S_n（或$\mathscr{R}$）的两个不可约表示空间$\mathscr{R}Y$和$\mathscr{R}Y'$是等价的，只需证明存在由$\mathscr{R}Y'$到$\mathscr{R}Y$的双方单值的线性映射$\hat{f}$，满足

$$\hat{g}\hat{f}=\hat{f}\hat{g},\qquad g\in S_n \tag{35.41}$$

或

$$\hat{u}\hat{f}=\hat{f}\hat{u},\qquad u\in\mathscr{R} \tag{35.42}$$

其中$\hat{g}$或$\hat{u}$表示矢量空间$\mathscr{R}$上的算子（即左正则表示的算子），它们对$\mathscr{R}$中元的作用被定义为左乘g或u

$$\begin{cases} \hat{g}v=gv \\ \hat{u}v=uv \end{cases},\qquad v\in\mathscr{R} \tag{35.43}$$

如下定义一个算子$\hat{f}$

$$\hat{f}v=vs,\qquad v\in\mathscr{R} \tag{35.44}$$

它显然是线性的，又$v_1s=v_2s\Longrightarrow v_1=v_2$(两边右乘$s^{-1}$)，表明$\hat{f}$是双方单值的。再则

$$\hat{f}(vY')=vY's=vsY=(v'Y)$$

说明$\hat{f}$将$\mathscr{R}Y'$映射为$\mathscr{R}Y$。最后

$$\hat{g}\hat{f}v=\hat{g}(vs)=gvs=(gv)s=(\hat{g}v)s=\hat{f}(\hat{g}v)=\hat{f}\hat{g}v$$

对$\mathscr{R}$的任意元v成立，表明(35.41)成立。这就证明了满足上

述条件的映射$\hat{f}$的存在，从而证明了2°。

3° 仍以Δ和Δ'表示产生Y和Y'的盘，现在Δ和Δ'属于不同的台。由杨算子的性质4°知，有

$$Y'vY=0, \qquad v\in\mathscr{R} \tag{35.28}$$

如果定理之3°不成立，即如$\mathscr{R}Y$和$\mathscr{R}Y'$是等价的，则有将$\mathscr{R}Y'$映为$\mathscr{R}Y$的一一线性映射$\hat{f}$，满足(35.42)。将(35.42)的两边作用于$\mathscr{R}Y'$的任意元Y'，得

$$u\hat{f}(Y')=\hat{f}(uY'), \qquad u\in\mathscr{R}$$

取$u=Y'$，又得

$$Y'\hat{f}(Y')=\hat{f}(Y'^2)=\hat{f}(\alpha Y')=\alpha\hat{f}(Y')$$

以Y右乘上式两边，注意$\hat{f}(Y')\in\mathscr{R}Y$，可得$\hat{f}(Y')=vY$，因而$\hat{f}(Y')Y=vY^2=\alpha vY=\alpha\hat{f}(Y')$，则上式化为

$$Y'\hat{f}(Y')Y=\alpha^2\hat{f}(Y') \tag{35.45}$$

已知$Y'\neq0$，故$\hat{f}(Y')\neq0$（$\hat{f}$是一一的），又知$\alpha^2\neq0$，由(35.45)得

$$Y'\hat{f}(Y')Y\neq0 \tag{35.46}$$

记$\hat{f}(Y')=v$，便立即看出，上式与(35.28)矛盾。所以，定理之3°不得不成立。

4° 为了证明$\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]}$等$n[\lambda]$个子空间是线性无关的，只需证明在各子空间中任取一非零矢量，得一线性无关组。在$\mathscr{R}Y_m^{[\lambda]}$中任取一非零矢量$v_mY_m^{[\lambda]}$，令（以下略去共同指标$[\lambda]$）

$$c_1v_1Y_1+c_2v_2Y_2+\cdots+c_nv_nY_n=0 \tag{35.47}$$

用最小盘的Y算子Y_1右乘上式，由杨算子的性质5°可知，上式除第一项外均化为零，从而有

$$c_1v_1Y_1^2=\alpha c_1v_1Y_1=0$$

但$\alpha\neq0$，$v_1Y_1\neq0$，故必须

$$c_1=0$$

而(35.47)化为

$$c_2v_2Y_2+\cdots+c_nv_nY_n=0 \tag{35.48}$$

再以次小盘的 Y_2 右乘上式，同理得到

$$c_2=0$$

以此类推，总之得出

$$c_1=c_2=\cdots=c_n=0 \tag{35.48}$$

从而证明了4°。

5° 需要证明两点：$h_1Y_1, h_2Y_1, \cdots, h_nY_1$（略去了指标 $[\lambda]$）是线性无关组；$[\lambda]$上的标准盘的个数（$n=n[\lambda]$）等于 $\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]}$ 的维数。

先来证明第一点。由于 $\Delta_m=h_m\Delta_1$ 和 (35.5)，有 $Y_m=h_mY_1h_m^{-1}$，或$h_mY_1=Y_mh_m$。因而，为了证明$\{h_1Y_1, h_2Y_1, \cdots, h_nY_1\}$无关，只要证明$\{Y_1h_1, Y_2h_2, \cdots, Y_nh_n\}$无关。令

$$c_1Y_1h_1+c_2Y_2h_2+\cdots+c_nY_nh_n=0 \tag{35.49}$$

依次用最大盘、次大盘、…的杨算子左乘上式，按证明(35.48)的同样方法得出

$$c_1=c_2=\cdots=c_n=0 \tag{35.50}$$

即所欲证。

再来证明第二点。设 $\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]}$ 的维数为 d_λ。由 $\mathscr{R}Y_m^{[\lambda]}$ 与 $\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]}$ 等价知，二者作为线性空间是同构的，因而有相同的维数。所以，子空间$\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]}, \mathscr{R}Y_2^{[\lambda]}, \cdots, \mathscr{R}Y_{n[\lambda]}^{[\lambda]}$ 的维数都为d_λ。又，诸$\mathscr{R}Y_m^{[\lambda]}$线性无关（对不同 m 的无关性即定理之4°；对不同$[\lambda]$ 的无关性，是由于不等价的表示空间是无关的），它们的维数和不能超过$\mathscr{R}$的维数，即有

$$\sum_\lambda n[\lambda]d_\lambda\leqslant n! \tag{35.51}$$

但前已证明了，$\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]}$中有$n[\lambda]$个无关矢量$\{h_mY_1\}$，因而又有

$$n[\lambda]\leqslant d_\lambda \tag{35.52}$$

由(34.4)，(35.51)又可写为

$$\sum_{\lambda} n[\lambda] d_{\lambda} \leqslant \sum_{\lambda} n^2[\lambda] \qquad (35.53)$$

对比(35.52)和(35.53)可知，必须有

$$n[\lambda] = d_{\lambda} \qquad (35.54)$$

即由$[\lambda]$的任意盘所产生的 S_n 的不可约表示的维数，恰为$[\lambda]$的标准盘的个数。

(2) $\mathscr{R}$的完全分解

由基本定理和(34.4)可见，S_n 的群代数$\mathscr{R}$的诸最小左不变子代数$\mathscr{R}Y_m^{[\lambda]}$的直和等于$\mathscr{R}$本身，即有$\mathscr{R}$的完全分解

$$\mathscr{R} = \sum_{\lambda, m} \oplus \mathscr{R} Y_m^{[\lambda]} \qquad (35.55)$$

这也就是$\mathscr{R}$作为 S_n 的正则表示空间的完全约化。这一约化是通过所有 n 次台的所有标准盘来实现的，每个不可约子空间的基都可按定理之5°的方式作出。

(3) S_n 的不可约表示与杨图

由于正则表示中含有全部不可约表示，我们在上述作法中实际上已经穷尽了 S_n 的所有不可约表示。在不计等价时，S_n 的不可约表示与 n 次台是一一对应的，因而习惯上也将n次台$[\lambda]$当作S_n 的不可约表示的标记。例如，不可约表示$[\lambda]$的表示空间可由$[\lambda]$的最小标准盘 $\varDelta_1^{[\lambda]}$ 来生成：$\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]}$。上面还证明了，不可约表示$[\lambda]$的维数等于$[\lambda]$的标准盘的个数，而且$[\lambda]$的不可约基可由$n[\lambda]$个标准盘$\varDelta_m^{[\lambda]}$来生成：$v_m^{[\lambda]} = h_m Y_1^{[\lambda]}$，$\varDelta_m^{[\lambda]} = h_m \varDelta_1^{[\lambda]}$。因而也可能将标准盘作为不可约基的标记。

为了具体地作出一个不可约表示，只需按上述方法作出一组不可约基，再将群元作用于（即左乘）各不可约基，从而便可写出表示的矩阵（可只对群的生成元写出）。

例 1 S_n 的表示$[n]$

先考虑由 n 次台$[n]$=□□□…□□所确定的 S_n 的不可

约表示。这个台只有一个标准盘$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1&2&\quad&n\\\hline\end{array}$，因而表示$[n]$是一维的。此标准盘产生的杨算子为$Y^{[n]}=\sum\limits_{p\in S_n}p$，因而生成的不可约基为$v^{[n]}=h_1Y^{[n]}=Y^{[n]}(h_1=e)$。将群元$s$作用（左乘）这个基矢，得

$$sv^{[n]}=\sum_{p\in S_n}sp=\sum_{p'\in S_n}p'=v^{[n]}$$

可见这个表示为

$$s\longrightarrow 1,\qquad s\in S_n \tag{35.56}$$

所以$[n]$是S_n的单位表示，也称为对称表示。

例 2 S_n的表示$[1^n]$

再来考虑由n次台$[1^n]=\begin{array}{|c|}\hline \\\hline \\\hline \\ \\\hline \\\hline\end{array}$所确定的$S_n$的表示。这个台也只有一个标准盘$\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline \\ \\\hline n\\\hline\end{array}$，因而表示$[1^n]$也是一维的。由此标准盘生成的不可约基是$v^{[1^n]}=Y^{[1^n]}=\sum\limits_{q\in S_n}\delta_q q\ (h_1=e)$，将群元$s$作用于此基矢，有

$$\begin{aligned}sv^{[1^n]}&=\sum_{q\in S_n}\delta_q sq=\sum_{q'\in S_n}\delta_{s^{-1}q'}q'\\&=\delta_s\sum_{q'\in S_n}\delta_{q'}q'=\delta_s v^{[1^n]}\end{aligned}$$

可见这个表示为

$$s\longrightarrow\delta_s,\quad s\in S_n \tag{35.57}$$

此表示也称为S_n的反对称表示。

显然，只有以上两个 n 次台具有唯一的标准盘，因而 S_n 只有$[n]$和$[1^n]$这两个一维不可约表示。

例 3 S_3的不可约表示

最后来考虑 S_3 的表示。共有三个 3 次台$[3]=\begin{array}{|c|c|c|}\hline \ & \ & \ \\ \hline\end{array}$，$[21]=\begin{array}{|c|c|}\hline \ & \ \\ \hline \ \\ \cline{1-1}\end{array}$，$[1^3]=\begin{array}{|c|}\hline \ \\ \hline \ \\ \hline \ \\ \hline\end{array}$，所以$S_3$有三个不可约表示。已知$[3]$是单位表示，$[1^3]$是反对称表示，现在只需考虑表示$[21]$。台$\begin{array}{|c|c|}\hline \ & \ \\ \hline \ \\ \cline{1-1}\end{array}$有两个标准盘$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array}$和$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1}\end{array}$，因而表示$[21]$是 2 维的，即$n[21]=2$. 标准盘的杨算子为

$$
\begin{aligned}
Y_1^{[21]}&=[(1)+(12)][(1)-(13)]\\
&=(1)+(12)-(13)-(132)\\
Y_2^{[21]}&=[(1)+(13)][(1)-(12)]\\
&=(1)-(12)+(13)-(123)
\end{aligned}
$$

显然

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1}\end{array}=(23)\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array}$$

可见有

$$h_2=(23)$$

所以$[21]$的不可约基为

$$
\begin{aligned}
v_1^{[21]}&=h_1Y_1^{[21]}=(1)+(12)-(13)-(132)\\
v_2^{[21]}&=h_2Y_1^{[21]}=-(12)+(23)-(123)+(132)
\end{aligned}
$$

将S_3的生成元(12)和(23)作用于这组基，得

$$
\begin{cases}
(12)v_1^{[21]}=v_1^{[21]}\\
(12)v_2^{[21]}=-(1)-(23)+(13)+(123)=-v_1^{[21]}-v_2^{[21]}
\end{cases}
$$

和

$$(23)v_1^{[21]}=h_2v_1^{[21]}=h_2Y_1^{[21]}=v_2^{[21]}$$

$$(23)v_2^{[2\,1]}=h_2^2Y_1^{[2\,1]}=Y_1^{[2\,1]}=v_1^{[2\,1]}$$

可见，在表示[21]中，生成元(12)和(23)在基$\{v_1^{[2\,1]},\ v_2^{[2\,1]}\}$下的矩阵为

$$\begin{cases} (12)\longrightarrow\begin{pmatrix}1 & -1\\ 0 & -1\end{pmatrix} \\ (23)\longrightarrow\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\end{cases} \tag{35.58}$$

由上述方法作出的 S_n 的不可约表示的矩阵一般并不是“标准矩阵”，构造“标准矩阵”的系统方法将在后面讨论。

§36 S_n 的单纯特征标

36.1 S_n 的单纯特征标与杨算子

即然S_n 的不可约表示[λ] 可由杨算子 $Y_1^{[\lambda]}$来生成，那么[λ]的特征标$\chi^{[\lambda]}$也就可由 $Y_1^{[\lambda]}$ 来确定。下面先导出由杨算子$Y_1^{[\lambda]}$来确定单纯特征标 $\chi^{[\lambda]}$ 的公式。

按定义，$\chi^{[\lambda]}(g)$等于正则表示的算子 $\hat{g}$ 在不可约子空间$\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]}$上的迹，$g\in S_n$

$$\chi^{[\lambda]}(g)=(\mathrm{tr}\hat{g})_{\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]}} \tag{36.1}$$

为了计算这个迹，我们利用将空间$\mathscr{R}$投影为子空间$\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]}$的算子$\hat{p}$（见定义(35.19)，并将其中的$Y$取为$Y_1^{[\lambda]}$）。在$\mathscr{R}$中取一组基$\{v_i\}$，使前面的$n[\lambda]$个基矢为$\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]}$的基，则有

$$\begin{aligned}\hat{g}\hat{p}v_i&=\hat{g}\hat{p}u_iY_1^{[\lambda]}=\hat{g}u_iY_1^{[\lambda]}Y_1^{[\lambda]}=\alpha\hat{g}u_iY_1^{[\lambda]}\\ &=\alpha\hat{g}v_i,\quad 当 i\leqslant n[\lambda]\end{aligned}$$

$$\hat{g}\hat{p}v_j=\hat{g}(v_jY_1^{[\lambda]})=\sum_{i=1}^{n[\lambda]}c_iv_i,\quad 当 j>n[\lambda]$$

从而可知

$$
\begin{aligned}
(\mathrm{tr}\hat{g}\hat{p})_{\mathscr{R}} &= \sum_{i=1}^{n[\lambda]}(\hat{g}\hat{p})_{ii} + \sum_{j=n[\lambda]+1}^{n'}(\hat{g}\hat{p})_{jj} \\
&= \alpha\sum_{i=1}^{n[\lambda]}(\hat{g})_{ii} + 0 \\
&= \alpha(\mathrm{tr}\hat{g})_{\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]}}
\end{aligned}
$$

可见，借助于算子$\hat{p}$，能够用$\hat{g}\hat{p}$在空间$\mathscr{R}$上的迹来表示$\hat{g}$在子空间$\mathscr{R}Y_1^{[\lambda]}$上的迹。于是(36.1)又可写为

$$
\chi^{[\lambda]}(g) = \frac{1}{\alpha}\cdot(\mathrm{tr}\hat{g}\hat{p})_{\mathscr{R}} \tag{36.2}
$$

为了计算上式中的迹，我们将使用$\mathscr{R}$的自然基$\{s\}$。总可将$\mathscr{R}$的元$Y_1^{[\lambda]}$写为自然基的线性组合，如以$Y_1^{[\lambda]}(s)$表示其组合系数，则有

$$
Y_1^{[\lambda]} = \sum_{s\in S_n} Y_1^{[\lambda]}(s)s \tag{36.3}
$$

与定义(35.1)对比，可知

$$
Y_1^{[\lambda]}(s) = \begin{cases} \delta_q, & \text{当} s = pq \\ 0, & \text{当} s \neq pq \end{cases} \tag{36.4}
$$

其中p、q都是相对于产生$Y_1^{[\lambda]}$的盘（即$[\lambda]$的最小标准盘）而言的。

将$\hat{g}\hat{p}$作用于基矢s，得

$$
\begin{aligned}
\hat{g}\hat{p}s &= \hat{g}(sY_1^{[\lambda]}) = gsY_1^{[\lambda]} = \sum_{h\in S_n} Y_1^{[\lambda]}(h)gsh \\
&= \sum_{h'\in S_n} Y_1^{[\lambda]}(s^{-1}g^{-1}h')h' = Y_1^{[\lambda]}(s^{-1}g^{-1}s)s + \cdots
\end{aligned}
$$

从而知

$$
(\hat{g}\hat{p})_{ss} = Y_1^{[\lambda]}(s^{-1}g^{-1}s)
$$

将此式对s求和即得$(\mathrm{tr}\hat{g}\hat{p})_{\mathscr{R}}$因而又可将(36.2)写为

$$
\chi^{[\lambda]}(g) = \frac{1}{\alpha}\sum_{s\in S_n} Y_1^{[\lambda]}(s^{-1}g^{-1}s) \tag{36.5}
$$

这就达到了用产生$[\lambda]$的杨算子来表示$[\lambda]$的特征标的目的。

还需将公式(36.5)进一步标准化。群元g^{-1}确定S_n的一个类$K_{g^{-1}}$；当s跑遍S_n时，$s^{-1}g^{-1}s$将多次跑遍$K_{g^{-1}}$，而且$K_{g^{-1}}$中的每个元重复出现的次数等于S_n中与g^{-1}对易的元的个数（有一个与g^{-1}对易的元x，就有一个元$y=xs$，使$y^{-1}g^{-1}y=s^{-1}g^{-1}s$）。由9.3节的(9.6)式可知，类$K_{g^{-1}}$被重复的次数为$N(S_n)/N(K_{g^{-1}})$，于是有

$$\sum_{s\in S_n} Y_1^{[\lambda]}(s^{-1}g^{-1}s)=\frac{N(S_n)}{N(K_{g^{-1}})}\cdot\sum_{s\in K_{g^{-1}}} Y_1^{[\lambda]}(s)$$

对于置换g来说，g^{-1}即是将g的各轮换中的数码次序颠倒后的置换，因而两者具有相同的循环结构，即g^{-1}和g属于同一个类。所以对置换群S_n，有

$$K_{g^{-1}}=K_g \tag{36.6}$$

再注意$N(S_n)=n!$，$N(K_g)=n(\nu)$（(ν)是类K_g的循环结构），以及$\alpha=n!/n[\lambda]$（由式(35.18)），最后可将(36.5)写为如下标准形状

$$\chi^{[\lambda]}(\nu)=\frac{n[\lambda]}{n(\nu)}\cdot\sum_{s\in(\nu)} Y_1^{[\lambda]}(s) \tag{36.7}$$

式中(ν)代表S_n的类，$n(\nu)$是类(ν)的阶，$n[\lambda]$是不可约表示$[\lambda]$的维数，$[\lambda]$的特征标已被写成了类函数的形状。

单纯特征标的基本公式(36.7)中含有三个因子：$n(\nu)$，$n[\lambda]$，$\sum\limits_{s\in(\nu)} Y_1^{[\lambda]}(s)$。类的阶$n(\nu)$具有明显的解析公式(5.8)。表示的维数$n[\lambda]$有递推公式(34.2)，当群$S_n$的$n$不大或对某些特殊的$[\lambda]$，用它来计算维数是方便的。后面我们还要给出一个$n[\lambda]$的解析公式。和$\sum\limits_{s\in(\nu)} Y_1^{[\lambda]}(s)$显然是一个类函数，而这类函数的形式是由表示$[\lambda]$决定的。由(36.4)可知

$$\sum_{s\in(\nu)} Y_1^{[\lambda]}(s) = \sum_{pq\in(\nu)} \delta_q \qquad (36.8)$$

其中 p 和 q 分别为产生 $Y_1^{[\lambda]}$ 的标准盘（台[λ]的最小标准盘）的水平置换和垂直置换。(36.8)的右端的意义是：属于类(ν)的所有 pq 数目的代数和。当 S_n 的 n 不大或对某些特殊的[λ]，可以直接计算这个代数和。

pq 所属的类取决于它的循环结构。由于 p 和 q 都是特殊置换，在某些简单情况下，很容易由 p 和 q 的循环结构定出 pq 的循环结构。p 和 q 都由独立轮换之积组成。由于盘的任一行与任一列至多有一个交点（共同数码），p 的任一轮换与 q 的任一轮换之间也只可能有两种关系：不相交（独立），或者只有一个交点（共同数码）。不相交的二轮换之积不必进行运算，而有一个交点的二轮换之积为一新的轮换，其长度等于相乘的二轮换的长度之和减 1 。事实上，当 $j=i$ 时，有

$$(i_1 j_1 j_2 \cdots j_r)(i_1 i_2 \cdots i_k) = (i_1 i_2 \cdots i_k j_1 j_2 \cdots j_r) \qquad (36.9)$$

利用上述事实，在某些简单情况下，不必进行乘积的具体演算就能确定 pq 的循环结构。

例 1　S_4 的特征标 $\chi^{[31]}(\nu)$

群 S_4 可写为

$$S_4 = \{(1),6(12),3(12)(34),8(123),6(1234)\}$$

在这种记法中，写出了每个类的一个代表元，代表元前面的数字就是那个类的阶。

表示[31]的维数（即台[31]的标准盘数）为

$$\begin{aligned} n[31] &= n[21] + n[3] \\ &= n[1^2] + n[2] + n[3] \\ &= 1+1+1 \\ &= 3 \end{aligned}$$

产生表示[31]的杨盘是

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 \\ \cline{1-1}\end{array}$$

我们来计算它的有确定循环结构的pq的个数之代数和。

要使 $pq=(1)$，必须 $p=q=(1)$，故属于S_4的第一个类的pq的数目为 1 。

要使pq具有(12)的循环结构，或者$p=(1)$而$q=(14)$；或者$p=(12),(23),(13)$，而$q=(1)$。可见，这时pq数的代数和为$-1+3=2$。

要使pq具有(12)(34)的循环结构，必须$p=(23)$，$q=(14)$。故所求之代数和为-1。

要使 pq 具有(123)的循环结构，或者 $p=(12),(13)$，而 $q=(14)$；或者$p=(123),(132)$，而 $q=(1)$。故所求的代数和为$-2+2=0$。

要使 pq具有(1234)的循环结构，必须 $p=(123),(132)$，而$q=(14)$。故所求的代数和为-2。

为醒目起见，可将以上结果和特征标值列成下表。

类（写出代表元）	(1)	(12)	(12)(34)	(123)	(1234)
$n(\nu)$	1	6	3	8	6
$n^{[31]}/n(\nu)$	3	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{2}$
$\sum\limits_{pq\in(\nu)}\delta_q$	1	2	-1	0	-2
$\chi^{[31]}(\nu)$	3	1	-1	0	-1

在第四章中，作出了点群O的单纯特征标的完整表。由于$S_4\cong O$，那实际上也是S_4的特征标表。不难看出，$\chi^{[31]}$与前面的$\chi^{(4)}$一致。

例 2 S_n 的特征标$\chi^{[\lambda]}(n-2,1,0,\cdots,0)$

此即 $\chi^{[\lambda]}$在(12)所属的类上的值。能够用上述方法求得任意单纯特征标在这个特殊类上的值的一般公式。

这个类的阶为

$$n(n-2,1,0,\cdots,0)=\frac{n!}{(n-2)!\,2}=\frac{n(n-1)}{2}$$

这时的 $\sum\limits_{s\in(\nu)} Y_1^{[\lambda]}(s)=\sum\limits_{pq=\text{对换}}\delta_q$。要使 pq=对换，必须 p=对换，而$q=(1)$；或者$p=(1)$，而 q=对换。因而，等于对换的 pq 其个数的代数和，等于水平对换数减去垂直对换数。

总的水平对换数等于各个行的对换数之和。对于台$[\lambda]$第 i 行的格子数为λ_i，因而这一行的对换数应为$\frac{1}{2}\lambda_i(\lambda_i-1)$。故总的水平对换数为

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{\lambda_i(\lambda_i-1)}{2}$$

垂直对换的总数等于各个列的对换数之和。对给定的台$[\lambda]$，有 1 个格子的列数为$(\lambda_1-\lambda_2)$，有 2 个格子的列数为$(\lambda_2-\lambda_3)$，有 k 个格子的列数为$(\lambda_k-\lambda_{k+1})$。每一有 k 个格子的列的对换数为 $k(k-1)/2$。从而台$[\lambda]$的垂直对换的总数为

$$\sum_{k=1}^{n}\frac{k(k-1)}{2}(\lambda_k-\lambda_{k+1})$$

此式可写为两项之差：第一项为

$$\sum_{k=1}^{n}\frac{k(k-1)}{2}\lambda_k=\sum_{k=2}^{n}\frac{k(k-1)}{2}\lambda_k$$

第二项为

$$\sum_{k=1}^{n}\frac{k(k-1)}{2}\lambda_{k+1}=\sum_{k=2}^{n+1}\frac{(k-1)(k-2)}{2}\lambda_k$$

$$=\sum_{k=2}^{n}\frac{(k-1)(k-2)}{2}\lambda_k$$

（注意$\lambda_{n+1}=0$）。代回原式，两项系数相减后得

$$\sum_{k=2}^{n}(k-1)\lambda_k=\sum_{k=1}^{n}(k-1)\lambda_k$$

总之有

$$\sum_{pq=\text{对换}}\delta_q=\sum_{k=1}^{n}\frac{\lambda_k(\lambda_k-1)}{2}-\sum_{k=1}^{n}(k-1)\lambda_k$$

$$=\sum_{k=1}^{n}\frac{\lambda_k(\lambda_k+1)}{2}-\sum_{k=1}^{n}k\lambda_k \qquad (36.10)$$

$$\chi^{[\lambda]}(\text{对换})=\frac{2n[\lambda]}{n(n-1)}\cdot\left\{\sum_{k=1}^{n}\frac{\lambda_k(\lambda_k+1)}{2}-\sum_{k=1}^{n}k\lambda_k\right\} \qquad (36.11)$$

36.2 佛罗比纳斯(Frobenius)公式

设x_1，x_2，…，x_m是m个独立变元，考虑它们的两个多项式。

$$D(x_1,x_2,\cdots,x_m)=\begin{vmatrix} x_1^{m-1} & x_1^{m-2}\cdots x_1 & 1\\ x_2^{m-1} & x_2^{m-2}\cdots x_2 & 1\\ & \cdots\cdots\cdots\cdots & \\ x_m^{m-1} & x_m^{m-2}\cdots x_m & 1\end{vmatrix}$$

$$=\sum_p\delta_p p x_1^{m-1}x_2^{m-2}\cdots x_m^0 \qquad (36.12)$$

其中p表对m个变元（$x_1,x_2,\cdots,x_m$）的置换。这显然是一个$m(m-1)/2$次的齐次反对称多项式。

对S_n的类$(\nu)=(\nu_1,\nu_2\cdots,\nu_n)$，定义多项式

$$S_{(\nu)}(x_1,x_2,\cdots,x_m)=(x_1+x_2+\cdots+x_m)^{\nu_2}(x_1^2$$

$$+x_2^2+\cdots+x_m^2)^{\nu_1}\cdots(x_1^n+x_2^n+\cdots x_m^n)^{\nu_n} \qquad (36.13)$$

由 $\nu_1+2\nu_2+\cdots+n\nu_n=n$ 容易看出，这是一个 n 次的齐次对称多项式。

作以上两个多项式的乘积 $S_{(\nu)}\cdot D$，将得到一个关于变元 $(x_1,x_2,\cdots,x_m)$ 的 $(n+m(m-1)/2)$ 次的齐次反对称多项式。将此乘积展开，可得

$$S_{(\nu)}\cdot D=\sum_{\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_m} a^{(\nu)}_{\mu_1\mu_2\cdots\mu_m} x_1^{\mu_1}x_2^{\mu_2}\cdots x_m^{\mu_m}$$

其中求和是对满足 $\sum_{i=1}^{m}\mu_i=n+m(m-1)/2$ 的所有 μ_i 进行。由上式关于变元的反对称性，可推知系数 a 关于下标 $(\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_m)$ 的反对称性。因而，任二下标相同的系数都为零，且非零系数的下标经偶置换时不变，经奇置换时变号。于是可写

$$\begin{aligned}\sum_{\mu_1\cdots\mu_m} & a^{(\nu)}_{\mu_1\cdots\mu_m} x_1^{\mu_1}\cdots x_m^{\mu_n}\\ &=\sum_{\mu_1>\mu_2>\cdots>\mu_m}\sum_p p\{a^{(\nu)}_{\mu_1\cdots\mu_m}x_1^{\mu_1}\cdots x_m^{\mu_m}\}\\ &=\sum_{\mu_1>\cdots>\mu_m} a^{(\nu)}_{\mu_1\cdots\mu_m}\sum_p\delta_p p\{x_1^{\mu_1}\cdots x_m^{\mu_m}\}\end{aligned}$$

从而有

$$S_{(\nu)}\cdot D=\sum_{\mu_1>\mu_2>\cdots>\mu_m} a^{(\nu)}_{\mu_1\mu_2\cdots\mu_m}\sum_p\delta_p p x_1^{\mu_1}x_2^{\mu_2}\cdots x_m^{\mu_m}$$

（注意：对乘积 $x_1^{\mu_1}x_2^{\mu_2}\cdots x_m^{\mu_m}$ 而言，置换 x 的幂指标与置换 x 本身是等同的）。再令

$$\mu_i=\lambda_i+m-i$$

又可写

$$\begin{aligned}S_{(\nu)}D=&\sum_{\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_m} a^{(\nu)}_{\lambda_1+m-1,\lambda_2+m-2,\cdots,\lambda_m}\\ &\sum_p\delta_p p x_1^{\lambda_1+m-1}x_2^{\lambda_2+m-2}\cdots x_m^{\lambda_m} \qquad (36.14)\end{aligned}$$

由 $\lambda_m\geqslant\mu_m\geqslant0$ 和 $\sum_i\mu_i=n+\dfrac{m(m-1)}{2}$，可知有

$$\begin{cases}\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_m \geqslant 0 \\ \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_m = n\end{cases} \tag{36.15}$$

式(36.15)表明，$[\lambda]=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_m]$确定群 S_n 的一个不可约表示（$\lambda_{m+1}=\lambda_{m+2}=\cdots=\lambda_n=0$），而$[\lambda]$的行数$\leqslant m$。因此，(36.14)中的和号可理解为对于行数$\leqslant m$的所有 n 次台$[\lambda]$求和。

佛罗比纳斯用诱导表示的方法直接计算 S_n 的特征标，从而证明了佛罗比纳斯定理[31]：式(36.14)中的系数等于 S_n 的单纯特征标$\chi^{[\lambda]}(\nu)$。于是，(36.14)又可写为如下形式

$$S_{(\nu)}D = \sum_{\substack{[\lambda] \\ [\lambda]\text{的行数}\leqslant m}} \chi^{[\lambda]}(\nu)\sum_p \delta_p p x_1^{\lambda_1+m-1} x_2^{\lambda_2+m-2}\cdots x_m^{\lambda_m} \tag{36.16}$$

公式(36.16)中包含了 S_n 的满足$[\lambda]$的行数$\leqslant m$ 的所有单纯特征标在类(ν)上的值。此公式除了具有重要理论价值外，还可用来计算S_n的特征标。为了计算S_n的任一单纯特征标$\chi^{[\lambda]}$在类(ν)上的值，可取 $m=[\lambda]$的行数，作出多项式D和 $S_{(\nu)}$，再计算 $S_{(\nu)}D$ 中 $x^{\lambda_1+m-1}x^{\lambda_2+m-2}\cdots x_m^{\lambda_m}$ 项的系数，这系数即为$\chi^{[\lambda]}(\nu)$。

例 计算S_4的特征标$\chi^{[31]}$。

$[31]$有两行，故取 $m=2$。显然 $D(x_1,x_2)=x_1-x_2$，$S_{(1)}(x_1,x_2)=(x_1+x_2)^4$，$S_{(2)}(x_1x_2)=(x_1+x_2)^2(x_1^2+x_2^2)$，$S_{(3)}(x_1,x_2)=(x_1^2+x_2^2)^2$，$S_{(4)}(x_1,x_2)=(x_1+x_2)(x_1^3+x_2^3)$，$S_{(5)}(x_1,x_2)=x_1^4+x_2^4$，其中已将$S_4$的 5 个类用其序号（按上小节中用的次序）简单标记了。

$\chi^{[31]}$在 5 个类上的值分别为以下五个多项式中的$x_1^{\lambda_1+1}x_2^{\lambda_2}=x_1^4x_2$项的系数

$$S_{(1)}D=(x_1+x_2)^4(x_1-x_2)$$

$$S_{(2)}D=(x_1+x_2)^2(x_1^2+x_2^2)(x_1-x_2)$$

$$S_{(3)}D=(x_1^2+x_2^2)^2(x_1-x_2)$$
$$S_{(4)}D=(x_1+x_2)(x_1^3+x_2^3)(x_1-x_2)$$
$$S_{(5)}D=(x_1^4+x_2^4)(x_1-x_2)$$

从而求得

$$\chi^{[31]}=3,1,-1,0,-1$$

这与上36.1节例1的结果相同。

36.3 不可约表示的维数

由佛罗比纳斯公式容易导出一个关于 S_n 的不可约表示的维数的解析公式。

$$n[\lambda]=\chi^{[\lambda]}(n,0,\cdots,0) \qquad (36.17)$$

而$\chi^{[\lambda]}(n,0,\cdots,0)$等于多项式

$$(x_1+x_2+\cdots+x_m)^n\cdot\sum_p\delta_p p x_1^{m-1}x_2^{m-2}\cdots x_m^0 \qquad (36.18)$$

中的$x_1^{\mu_1}x_2^{\mu_2}\cdots x_m^{\mu_m}$项的系数。其中$m$为$[\lambda]$的行数，$\mu_i=\lambda_i+m-i$。下面来计算这个系数。为此，先将(36.18)中的$\sum\limits_p$式改写为

$$\sum_{(k)}\pm x_1^{k_1}x_2^{k_2}\cdots x_m^{k_m} \qquad (36.19)$$

其中$(k)=(k_1,k_2,\cdots,k_m)$表示m个数$(m-1,m-2,\cdots,0)$的任意一个排列，当它由递降排列经偶置换得出时，相应的项取正号，当它由递降排列经奇置换得出时，相应的项取负号。因为$x_1^{k_1}x_2^{k_2}\cdots x_m^{k_m}$的项只有与

$$x_1^{\mu_1-k_1}x_2^{\mu_2-k_2}\cdots x_m^{\mu_m-k_m} \qquad (36.20)$$

的项相乘时，才能生成$x_1^{\mu_1}\cdots x_m^{\mu_m}$的项，而$(x_1+\cdots+x_m)^n$中(36.20)项的系数为$n!/[(\mu_1-k_1)!(\mu_2-k_2)!\cdots(\mu_m-k_m)!]$，所以(36.19)中$(k)=(k_1,\cdots,k_m)$的项对所求系数的贡献为

$$\pm\frac{n!}{(\mu_1-k_1)!(\mu_2-k_2)!\cdots(\mu_m-k_m)!} \qquad (36.21)$$

将(36.21)按(36.19)的方式对(k)求和，即得出(36.19)的所有

项对所求系数的贡献。从而有

$$n[\lambda]=n!\sum_{(k)}\pm\frac{1}{(\mu_1-k_1)!(\mu_2-k_2)!\cdots(\mu_m-k_m)!}$$

$$=n!\begin{vmatrix}\frac{1}{[\mu_1-(m-1)]!} & \frac{1}{[\mu_1-(m-2)]!} & \cdots & \frac{1}{\mu_1!}\\ \frac{1}{[\mu_2-(m-1)]!} & \frac{1}{[\mu_2-(m-2)]!} & \cdots & \frac{1}{\mu_2!}\\ \cdots & \cdots & & \\ \frac{1}{[\mu_m-(m-1)]!} & \frac{1}{[\mu_m-(m-2)]!} & \cdots & \frac{1}{\mu_m!}\end{vmatrix} \tag{36.22}$$

对(36.22)的两边乘以 $\mu_1!\mu_2!\cdots\mu_m!$，并注意对行列式乘一数时可以乘到其任意行上去，从而可将$\mu_1!$乘到第一行上，将$\mu_2!$乘到第二行上，…，结果(36.22)化为

$$\frac{\mu_1!\mu_2!\cdots\mu_m!}{n!}n[\lambda]$$

$$=\begin{vmatrix}\mu_1[\mu_1-1]\cdots[\mu_1-(m-2)] & \mu_1[\mu_1-1]\cdots[\mu_1-(m-3)] & \cdots & \mu_1 & 1\\ \mu_2[\mu_2-1]\cdots[\mu_2-(m-2)] & \mu_2[\mu_2-1]\cdots[\mu_2-(m-3)] & \cdots & \mu_2 & 1\\ \cdots\quad\cdots & \cdots\quad\cdots & \cdots & \cdots & \\ \mu_m[\mu_m-1]\cdots[\mu_m-(m-2)] & \mu_m[\mu_m-1]\cdots[\mu_m-(m-3)] & \cdots & \mu_m & 1\end{vmatrix} \tag{36.23}$$

(36.23)中行列式的第1列是μ的$(m-1)$次多项式，第2列是μ的$(m-2)$次多项式，…。整个行列式可按这些多项式分解为许多同阶行列式的线性组合。在所有这些行列式中，没有相同的列的行列式只有一个，其余的行列都因含有相同的列而

等于零。唯一的非零行列式为

$$D(\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_m)=\begin{vmatrix} \mu_1^{m-1} & \mu_1^{m-2} & \cdots & \mu_1 & 1 \\ \mu_2^{m-1} & \mu_2^{m-2} & \cdots & \mu_2 & 1 \\ & \cdots & \cdots & & \\ \mu_m^{m-1} & \mu_m^{m-2} & \cdots & \mu_m & 1 \end{vmatrix} \tag{36.24}$$

其系数为1。从而(36.23)又化为

$$n[\lambda]=\frac{n!}{\mu_1!\,\mu_2!\cdots\mu_m!}\cdot D(\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_m) \tag{36.25}$$

其中

$$m=[\lambda]\text{的行数} \tag{36.26}$$

$$\mu_i=\lambda_i+m-i \tag{36.27}$$

注意到D是一范德蒙行列式，维数公式(36.25)又可写为更便于直接计算的形式

$$n[\lambda]=\frac{n!}{\mu_1!\,\mu_2!\cdots\mu_m!}\cdot\prod_{i<j}(\mu_i-\mu_j) \tag{36.28}$$

例　计算S_8的表示[431]的维数。

[431]的行数$m=3,\lambda_1=4,\lambda_2=3,\lambda_3=1$；按(36.27)，$\mu_1=6,\mu_2=4,\mu_3=1$；$n=8$。代入公式(36.28)，得

$$n[431]=\frac{n!}{\mu_1!\,\mu_2!\,\mu_3!}(\mu_1-\mu_2)(\mu_1-\mu_3)(\mu_2-\mu_3)$$

$$=\frac{8!}{6!\,4!\,1!}(6-4)(6-1)(4-1)$$

$$=70$$

36.4 单纯特征标的递推公式

我们看到，当S_n的n较大时，通过计算多项式(36.16)的系数的方法来计算特征标，是很麻烦的。系统地构造置换群的特征标表，可逐次增大n，因而在计算S_n的特征标时，较低阶

群的特征标将是已知的。这样便可使用特征标的递推公式。由佛罗比纳斯公式可以导出一个这样的递推公式，它给出了S_n的特征标与阶数较低的S_{n-r}的特征标之间的关系。

设(ν)是S_n的一个类，如果(ν)的循环结构中含有一个r项轮换，则去掉这个r项轮换后将得到S_{n-r}的一个类(ν')

$$(\nu')=(\nu_1,\nu_2,\cdots,\nu_{r-d},\nu_r-1,\nu_{r+1},\cdots,\nu_{n-r}) \qquad (36.29)$$

（注意：(ν)含有r项轮换意味着$\nu_r>0$，从而又有$\nu_{n-r+1}=\nu_{n-r+2}=\cdots=\nu_n=0$）。取$m=[\lambda]$（$S_n$的表示）的行数，由佛罗比纳斯公式知，$[\lambda]$的特征标在类$(\nu)$上的值$\chi^{[\lambda]}(\nu)$等于多项式$S_{(\nu)}D$中$x_1^{\mu_1}x_2^{\mu_2}\cdots x_m^{\mu_m}$项的系数，$\mu_i=\lambda_i+m-i$。又由(36.29)知

$$S_{(\nu)}=(x_1^r+x_2^r+\cdots+x_m^r)\cdot S_{(\nu')} \qquad (36.30)$$

将上式代入$S_{(\nu)}D$，并对$S_{(\nu')}D$应用公式(36.16)，得出

$$S_{(\nu)}D=(x_1^r+x_2^r+\cdots+x_m^r)\cdot\sum_{\substack{[\lambda']\\ [\lambda]\text{的行数}\leqslant m}}\chi^{[\lambda']}(\nu')$$

$$\sum_p\delta_p p x_1^{\mu_1'}x_2^{\mu_2'}\cdots x_m^{\mu_m'} \qquad (36.31)$$

其中

$$\mu_i'=\lambda_i'+m-i \qquad (36.32)$$

$\chi^{[\lambda']}(\nu')$是群S_{n-r}的单纯特征标。

式(36.31)中的p即可理解为对变元x_i本身的置换，也可以理解为对$(\mu_1',\mu_2',\cdots,\mu_m')$的置换。为了计算(36.31)中$x_1^{\mu_1}\cdots x_m^{\mu_m}$项的系数，以下约定对$p$作后一种理解。这样可将(36.31)写为

$$S_{(\nu)}D=\sum_{[\lambda']}\sum_p\delta_p\chi^{[\lambda']}(\nu')p\{x_1^{\mu_1'+r}\cdots x_2^{\mu_2'}x_m^{\mu_m'}+\cdots$$

$$+x_1^{\mu_1'}\cdots x_{m-1}^{\mu_{m-1}'}x_m^{\mu_m'+r}\}$$

$$(36.33)$$

上式中的$x_1^{\mu_1}\cdots x_m^{\mu_m}$项必须满足

$$p(\mu_1',\mu_2',\cdots,\mu_m')+\begin{Bmatrix}(r,0,0,\cdots,0)\\(0,r,0,\cdots,0)\\\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\(0,\ \cdots,\ 0,r)\end{Bmatrix}$$

$$=(\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_m)$$

或

$$(\mu_1',\mu_2',\cdots,\mu_m')=\begin{cases}p^{-1}(\mu_1-r,\mu_2,\cdots,\mu_m)\\p^{-1}(\mu_1,\mu_2-r,\mu_3,\cdots,\mu_m)\\\quad\cdots\quad\cdots\quad\cdots\\p^{-1}(\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_{m-1},\mu_m-r)\end{cases}\tag{36.34}$$

这个关系限定了所有允许的$[\mu']$，以及与每个允许的$[\mu']$相联系的p。从而(36.33)中$x_1^{\mu_1}\cdots x_m^{\mu_m}$项的系数为

$$\chi^{[\lambda]}(\nu)=\sum_{[\lambda']}{}'\delta_p\chi^{[\lambda']}(\nu')\tag{36.35}$$

其中$\sum_{[\lambda']}'$表示只对满足(36.34)的$[\lambda']$求和，而$\delta_p=\delta_{p^{-1}}$由$[\lambda']$决定。这就是特征标的递推公式。

例如，我们考虑S_{12}的不可约表示$[43^21^2]$的特征标在类$(\nu)=(0101010\cdots0)$上的值$\chi^{[43^21^2]}(\nu)$。这时可以运用三种不同的递推方式。S_{12}的类(ν)的代表元为(12)(3456)(789101112)，它含有三个不同长度的轮换。去掉长度为2的轮换，得到S_{10}的一个类(ν')；去掉长度为4的轮换，得到S_8的一个类(ν'')；去掉长度为6的轮换，得到S_6的一个类(ν''')。这三个类的代表元分别为：(1234)(5678910)，(12)(345678)和(12)(3456)。因而，

S_{12}的特征标$\chi^{[43^21^2]}(\nu)$可以分别用S_{10}，S_8，S_6的特征标来表示。

第一种递推方式：使用S_{10}的特征标。$[43^21^2]$的行数$m=5$，$[\lambda]=[43311]$，$(\mu)=(8,6,5,2,1)$，$r=2$。将(μ)的分量依次减2，得

$$
\begin{array}{ll}
(6,6,5,2,1) & \times \\
(8,4,5,2,1) & \checkmark \\
(8,6,3,2,1) & \checkmark \\
(8,6,5,0,1) & \checkmark \\
(8,6,5,2,-1) & \times
\end{array}
$$

其中，右边打×者经任何置换都不能成为(μ')（注意：$\mu'_1>\mu'_2>\cdots>\mu'_m\geqslant 0$），右边打√者则可经一置换生成某个$(\mu')$。因而有

(μ')	$[\lambda']$	δ_p
(8,5,4,2,1)	[42211]	-1
(8,6,3,2,1)	[43111]	1
(8,6,5,1,0)	[43300]	-1

代入(36.35)，得

$$
\chi^{[43^21^2]}(\nu)=-\chi^{[42^21^2]}(\nu')+\chi^{[431^3]}(\nu')-\chi^{[43^2]}(\nu')
$$

第二种递推公式：使用S_8的特征标。这时$r=4$。将$(\mu)=(8,6,5,2,1)$的分量逐次减4，并将允许的(μ')、$[\lambda']$和相应的δ_p列成下表

$(\mu)-(\cdots 4\cdots)$	(μ')	$[\lambda']$	δ_p
(4,6,5,2,1)	(6,5,4,2,1)	[22211]	1
(8,2,5,2,1)	×		
(8,6,1,2,1)	×		
(8,6,5,−2,1)	×		
(8,6,5,2,−3)	×		

代入(36.35) 得

$$\chi^{[43^2 1^2]}(\nu) = \chi^{[2^3 1^2]}(\nu'')$$

第三种递推方式：使用S_6的特征标。这时$r=6$，有下表

$(\mu)-(\cdots 6\cdots)$	(μ')	$[\lambda']$	δ_p
(2,6,5,2,1)	×		
(8,0,5,2,1)	(8,5,2,1,0)	[42000]	−1
(8,6,−1,2,1)	×		
(8,6,5,−4,1)	×		
(8,6,5,2,−5)	×		

代入(36.35)得

$$\chi^{[43^2 1^2]}(\nu) = -\chi^{[42]}(\nu''')$$

用不同的方式进行递推，所有结果是一致的。在实际计算中取何种方式较为方便，取决于手头的已知数据。一般地说，先去掉较长的轮换简便些，例如上例中的第三种方式。

S_6的类(ν''')的循环结构为$(\cdot\cdot)(\cdot\cdot\cdot\cdot)$，再去掉一个长度为4的轮换，便得$S_2$的循环结构为$(\cdot\cdot)$的类。对$\chi^{[42]}(\nu''')$用递推公式可得

$$\chi^{[42]}(\nu''') = -\chi^{[1^2]}((\cdot\cdot)) = -(-1) = 1$$

最后得到

$$\chi^{[43^21^2]}(\nu)=-1$$

36.5 分支律

设H是群G的一个子群，$A^{(i)}$为G的不可约表示，$\gamma^{(k)}$为H的不可约表示，则当把$A^{(i)}$看作H的表示时，一般为可约的，并可写

$$A^{(i)}|_H=\sum_k a_k^{(i)}\gamma^{(k)} \tag{36.36}$$

其中的$\sum$为直和。(36.36)式通常称为是$G\longrightarrow H$的分支律，它给出了$\gamma^{(k)}$在$A^{(i)}$中的重复度。如果用单纯特征标来代替相应的不可约表示，(36.36)也可表为

$$\chi^{(i)}(g)=\sum_k a_k^{(i)}\mu^{(k)}(g),\quad g\in H \tag{36.37}$$

对于置换群，容易由特征标的递推公式求得$S_n\longrightarrow S_{n-1}$的分支律。

S_n中形如

$$S=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & n-1 & n\\ S_1 & S_2 & \cdots & S_{n-1} & n\end{pmatrix}=(n)S',\quad s'\in S_{n-1} \tag{36.38}$$

的置换形成S_n的一个子群，这子群与S_{n-1}同构，在此对它和S_{n-1}可不加区分。设(ν')为S_{n-1}的任一类，则由(36.38)可知，它在S_n中属于类

$$(\nu)=(\nu_1'+1,\nu_2',\cdots,\nu_{n-1}',0) \tag{36.39}$$

现在对S_n的特征标$\chi^{[\lambda]}(\nu)$应用递推公式。这时$r=1$，须将(μ)的分量逐次减1。如果所得的数列仍为递降的，便得出一个允许的(μ')，且相应的$\delta_p=1$；如果所得的数列不是递降的，则不存在相应的(μ')。若依次将n次台$[\lambda]$的各行去掉一个（最右边的）格子，则所得图形可能是一个$(n-1)$次台（当这行的格子数大于下一行的格子数），也可能不是（当这行的格子数等于下一行的格子数）。因此，在递推公式的右边所出现的$[\lambda']$应为按上述方式由n次台$[\lambda]$所产生的所有$(n-1)$次台，而

(36.35)化为

$$\chi^{[\lambda]}(\nu)=\sum_{[\lambda']}{}'\chi^{[\lambda']}(\nu') \qquad (36.40)$$

从而得到$S_n \longrightarrow S_{n-1}$的分支律

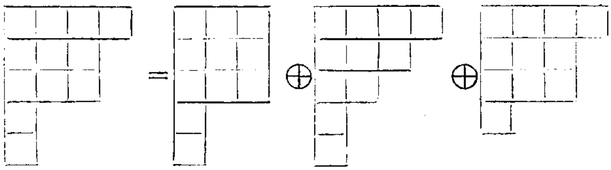
$$[\lambda]=\sum_{[\lambda']}{}'[\lambda'] \qquad (36.41)$$

其中$\sum'$表示对由n次台$[\lambda]$产生的所有$(n-1)$次台求和。上式也可明显地写为

$$[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n] = \sum_{\substack{k \\ (\lambda_k>\lambda_{k+1})}} [\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_k-1,\cdots,\lambda_{n-1}] \qquad (36.42)$$

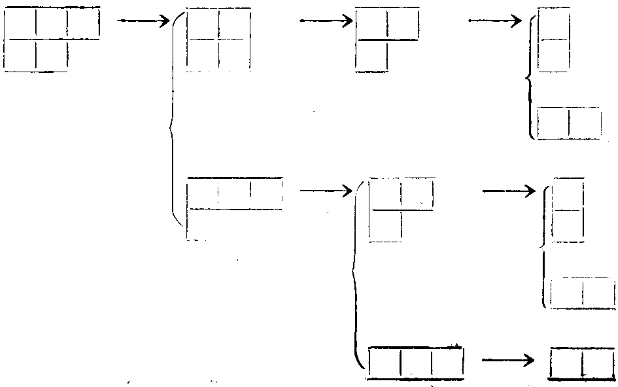
以上两式中的求和均应理解为直和。

例 1 将S_{12}的表示$[43^2 1^2]$按S_{11}约化。



$$[43^2 1^2]=[3^3 1^2]\oplus[4321^2]\oplus[43^2 1]$$

例 2 将S_5的表示$[32]$按群链$S_4 \supset S_3 \supset S_2$约化。



$$[32]=[2^2]\oplus[31]=2[21]\oplus[3]=2[1^2]\oplus3[2]$$

36.6 对偶表示

在13.1节中，我们引入了对偶表示的概念，并指出了，幺正表示的对偶表示就是其复共轭表示。在13.3节中，我们证明了，欲用两个不可约表示空间的直积空间来构造群的不变矢量（即群的单位表示变换的矢量），那两个表示必须是对偶的，且只存在唯一的（可差一常系数）不变矢量

$$w=\sum_{i=1}^{m}u_i\tilde{u}_i \qquad ((13.13))$$

其中$\{u_i\}$和$\{\tilde{u}_i\}$是二对偶表示的对偶基。

借助于上述概念，可以构造物理体系相对于其对称群的不变量。这对建立体系在对称群下不变的运动方程，显然是重要的。

回到置换群的具体讨论。对于全同多粒子体系，在置换粒子的变数时，其波函数只能按S_n的对称表示$[n]$或反对称表示$[1^n]$变换。因而在构造全同粒子体系的波函数时，将会遇到由S_n的不可约表示的直积生成表示$[n]$或$[1^n]$的问题。

在下一节中，我们将表明，置换群的不可约表示的矩阵总可取为实正交矩阵。注意到正交矩阵等于它的转置矩阵的逆，便可看出，置换群的所有不可约表示都是自偶的，而且使表示的矩阵为实正交矩阵的不可约基是它自已的对偶基。因而，如取这样的不可约基$\{\psi_m^{[\lambda]}\}$，则(13.13)可写为

$$\Psi^{[n]}=\sum_m\psi_m^{[\lambda]}\varphi_m^{[\lambda]} \qquad (36.43)$$

即$[n]$可由不可约表示$[\lambda]$的自直积生成。上式中的$\{\varphi_m^{[\lambda]}\}$的变换矩阵与$\{\psi_m^{[\lambda]}\}$的相同。

为了生成反对称表示$[1^n]$，由(13.14)写出

$$[\lambda]\otimes[\lambda]=[n]\oplus\cdots$$

两边与$[1^n]$作直积，注意$[1^n]\otimes[n]=[1^n]$，得到

$$[\lambda]\otimes\{[1^n]\otimes[\lambda]\}=[1^n]\oplus\cdots$$

可见，$[1^n]$应由表示$[\lambda]$ 与 $[1^n]\otimes[\lambda]$ 的直积来生成。$[1^n]\otimes[\lambda]$显然是S_n 的一个不可约表示，记

$$[\tilde{\lambda}]=[1^n]\otimes[\lambda] \tag{36.44}$$

则有

$$[\lambda]\otimes[\tilde{\lambda}]=[1^n]\oplus\cdots \tag{36.45}$$

并由 (13.14)知，若不可约基 $\{\psi_m^{[\lambda]}\}$ 和 $\{\varphi_m^{[\tilde{\lambda}]}\}$ 使表示矩阵 $A^{[\lambda]}(s)$为实正交的，且 $A^{[\tilde{\lambda}]}(s)=\delta_s A^{[\lambda]}(s)$，则有

$$\Psi^{[1^n]}=\sum_m \psi_m^{[\lambda]}\varphi_m^{[\tilde{\lambda}]} \tag{36.46}$$

即$[1^n]$可由$[\lambda]$ 和$[\tilde{\lambda}]$的直积生成。

我们看到，按对偶表示的一般定义，置换群的所有不可约表示都是自偶的。因而对置换群来说，这样的对偶概念已失去其独立的意义。所以，对置换群，通常采取另一种对偶表示的定义。由上面的讨论可见，为了构造总反对称的波函数(13.17)，与表示$[\lambda]$ 相关的表示$[\tilde{\lambda}]$是重要的。于是在置换群的表示论中，将$[\tilde{\lambda}]=[1^n]\otimes[\lambda]$定义为$[\lambda]$的对偶表示。

按上述定义，对偶表示的特征标之间有如下关系

$$\chi^{[\tilde{\lambda}]}(s)=\delta_s\chi^{[\lambda]}(s),\quad s\in S_n \tag{36.47}$$

反过来由这个关系也可推知 (36.44) 成立。所以，也可将(36.47)作为对偶表示的定义。

注意 $[\lambda]$ 和 $[\tilde{\lambda}]$ 作为不可约表示的记号只表明了表示的等价类，而不是表示的矩阵。所以(36.44)或(36.47)一般并不要求有矩阵关系

$$A^{[\tilde{\lambda}]}(s)=\delta_s A^{[\lambda]}(s),\quad s\in S_n \tag{36.48}$$

但要求存在使(36.48)成立的不可约基，即$[\tilde{\lambda}]$的矩阵总可通过相似变换化为(36.48)。(36.46)只对满足(36.48)的基才成立。

可以将上述结果更明确地概括成为关于置换群的对偶表示的一个定理。

定理 1　1°　$[\lambda]\otimes[\lambda']$ 包含 $[1^n]\Longleftrightarrow[\lambda']=[\tilde{\lambda}]$；2°　$[\lambda]\otimes[\tilde{\lambda}]$仅含$[1^n]$一次，且有$\Psi^{[1^n]}=\sum\limits_m\psi_m^{[\lambda]}\varphi_m^{[\tilde{\lambda}]}$，其中$\{\psi_m^{[\lambda]}\}$和$\{\varphi_m^{[\tilde{\lambda}]}\}$分别按$A^{[\lambda]}(s)$和$A^{[\tilde{\lambda}]}(s)=\delta_s A^{[\lambda]}(s)$变换。

这个定理指出了，如何利用对偶表示来构造总反称的波函数。

由定义(36.44)立即看出，相互对偶的表示是相互决定的。因而，两个分割$[\lambda]$和$[\tilde{\lambda}]$也是相互决定的。这个相互决定的关系简单地表现为它们的台互为转置。我们将这个重要性质写成为关于置换群的对偶表示的另一个定理。

定理 2　$[\tilde{\lambda}]$的台与$[\lambda]$的台互为转置。

证明　我们来计算两个互为转置的台所决定的表示的特征标。为此，取台$[\lambda]$的一个标准盘$\Delta^{[\lambda]}$和转置台$[\tilde{\lambda}]$的一个标

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|}\hline 1&2&3&4&5\\\hline 6&7&8&&\\\cline{1-3} 9&&&&\\\cline{1-1}\end{array}\qquad\qquad\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&6&9\\\hline 2&7&\\\cline{1-2} 3&8&\\\cline{1-2} 4&&\\\cline{1-1} 5&&\\\cline{1-1}\end{array}$$

$$\Delta^{[\lambda]}\qquad\qquad\qquad\Delta^{[\tilde{\lambda}]}$$

准盘$\Delta^{[\tilde{\lambda}]}$，后者为前者的转置。设$p$和$q$分表$\Delta^{[\lambda]}$的水平置换与垂直置换，则$\Delta^{[\lambda]}$产生的杨算子可写为

$$Y^{[\lambda]}=\sum\delta_q pq=\sum_s Y^{[\lambda]}(s)s$$

注意到$\Delta^{[\tilde{\lambda}]}$的水平（垂直）置换恰为$\Delta^{[\lambda]}$的垂置（水平）置换，又可将$\Delta^{[\tilde{\lambda}]}$产生的杨算子写为

$$\begin{aligned}Y^{[\tilde{\lambda}]}&=\sum\delta_p qp=\sum_s Y^{[\tilde{\lambda}]}(s)s\\&=\sum\delta_{p^{-1}}q^{-1}p^{-1}=\sum\delta_p(pq)^{-1}\\&=\sum\delta_{pq}\delta_q(pq)^{-1}\end{aligned}$$

对比以上二式，并取$s=pq$，便可得出

$$Y^{[\tilde{\lambda}]}(s^{-1})=\delta_s Y^{[\lambda]}(s)$$

代入特征标公式（36.7），注意s^{-1}与s属于同一个类，有$\sum\limits_{s\in(\nu)}Y^{[\tilde{\lambda}]}(s)=\sum\limits_{s\in(\nu)}Y^{[\tilde{\lambda}]}(s^{-1})$，从而得到

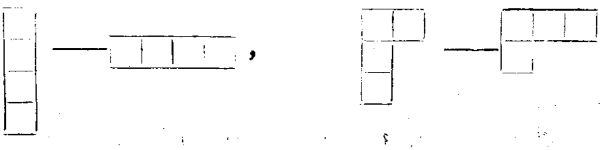
$$\chi^{[\tilde{\lambda}]}(s)=\delta_s\chi^{[\lambda]}(s)$$

或写为类函数形式：

$$\chi^{[\tilde{\lambda}]}(\nu)=\delta_{(\nu)}\chi^{[\lambda]}(\nu)$$

其中$\delta_{(\nu)}$对奇置换的类为负1，对偶置换的类为正1。这与（36.47）一致，从而证明了：互为转置的两个台所决定的表示是彼此对偶的。

定理2给出一个非常简便的判据，可由表示的标记——台直接判定对偶关系。例如，S_4的5个不可约表示之间显然有以下对偶关系





即有

$$[\widetilde{1^4}]=[4],[\widetilde{21^2}]=[31],\ \ [\widetilde{2^2}]=[2^2]$$

其中$[2^2]$是自偶的。

在任意置换群的不可约表示的完全集中，除自偶表示外，其余表示都是两两互偶的。

§ 37 S_n 的不可约表示的标准矩阵

37.1 标准矩阵的构造

不可约表示$[\lambda]$的矩阵形式不是唯一的，可以差一相似变换。因而在具体地确定$[\lambda]$的矩阵形状时，还可引入一些附加限制。我们要求$[\lambda]$的矩阵满足以下条件：

1° $A^{[\lambda]}(s)$是实正交的；

2° $A^{[\lambda]}(s)$作为群链$S_n\supset S_{n-1}\supset\cdots\supset S_2$中各子群的表示，都是完全约化了的。

这样的矩阵可称为$[\lambda]$的标准矩阵。下面将推导标准矩阵的形状。

为了得到对所有群元s的矩阵$A^{[\lambda]}(s)$，只需作出生成元的矩阵。在9.2节的例2中我们已证明了，S_n的生成元可取为$(n-1)$个对换

$$(1\quad 2),(2\quad 3),\cdots,(n-2,n-1),(n-1,n)$$

其中$(1\quad 2)$是S_2的生成元，$\{(1\quad 2),(2\quad 3)\}$是$S_3$的生成元，$\{(1\quad 2),(2\quad 3),(3\quad 4)\}$是$S_4$的生成元，等等。可见，对于构造标准矩阵来说，取$S_n$的这组生成元最为方便。现在就取定这组生成元，并需计算矩阵

$$A^{[\lambda]}((1\ 2)),A^{[\lambda]}((2\ 3)),\cdots,A^{[\lambda]}((n-1,n))$$

以上$(n-1)$个矩阵可用归纳法逐次作出。假定S_{n-1}的表示的标准矩阵已作出，求S_n的表示的标准矩阵。由于前$(n-2)$个矩阵是关于S_{n-1}的元的，它们作为S_{n-1}的表示矩阵都有对角块形，对角块为S_{n-1}的不可约表示矩阵。按假定，这些矩阵都是已知的，故需计算的是最后一个矩阵$A^{[\lambda]}((n-1,n))$。

下面就来计算矩阵$A^{[\lambda]}((n-1,n))$。为清晰起见，分为以下几步考虑。

(1) 确定$A^{[\lambda]}((n-1,n))$的一般形状

对换$(n-1,n)$显然与S_{n-2}的全部元可易，从而$A^{[\lambda]}((n-1,n))$与所有$A^{[\lambda]}(s')(s'\in S_{n-2})$可易。为了利用这一点，需先将$A^{[\lambda]}(s')$写为对角块形。记

$$[\lambda]_r=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_r-1,\cdots]$$
$$[\lambda]_{rs}=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_r-1,\lambda_s-1,\cdots]$$

即：$[\lambda]_r$表示将台$[\lambda]$的第r行最右边的格子去掉（如果这是允许的）后所得到的$(n-1)$次台；类似的，$[\lambda]_{rs}$表去掉两个格子后所得的$(n-2)$次台。$[\lambda]_r$和$[\lambda]_{rs}$分别确定S_{n-1}和S_{n-2}的不可约表示。这时，分支律(36.42)可写为

$$[\lambda]=\sum_r{}'[\lambda]_r \tag{37.1}$$

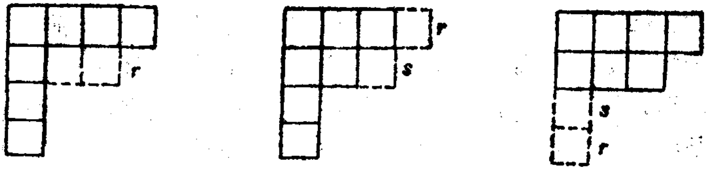
同样又可将S_{n-1}的表示$[\lambda]_r$作为S_{n-2}的表示进行分解

$$[\lambda]_r=\sum_s{}'[\lambda]_{rs} \tag{37.2}$$

从而得出$S_n\longrightarrow S_{n-2}$的分支律

$$[\lambda]=\sum_{rs}{}'[\lambda]_{rs} \tag{37.3}$$

其中$\sum'$表示对允许的下标求和。显然，能够在$[\lambda]$的约化中出现的$[\lambda]_{rs}$只有如图37.1所示的三种情形。情形(a)：$[\lambda]_{rr}$出现一次，当$\lambda_r>\lambda_{r+1}+1$；情形$(b)$：$[\lambda]_{rs}=[\lambda]_{sr}$同时出现，当$\lambda_r>\lambda_{r+1}$，而$\lambda_s>\lambda_{s+1}$；情形$(c)$：$[\lambda]_{rs}$出现而$[\lambda]_{sr}$不出现，



(a) (b) (c)

图 37.1 [λ]中的$[\lambda]_{rs}$

当$s=r-1$，$\lambda_s=\lambda_r>\lambda_{r+1}$。(37.3)表明，有

$$A^{[\lambda]}(s')=\begin{pmatrix} \ddots & & & & & \\ & A^{[\lambda]_{rr}} & & & 0 & \\ & & \ddots & & & \\ & & & A^{[\lambda]_{rs}} & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & A^{[\lambda]_{sr}} & \\ & & & & & \ddots \\ & 0 & & & & A^{[\lambda]_{r\,r-1}} \\ & & & & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad s'\in S_{n-2} \tag{37.4}$$

其中 $A^{[\lambda]_{rs}}$ 为 S_{n-2} 的不可约表示$[\lambda]_{rs}$的标准矩阵。上式中写出的对角子块是以上三种不同类型的代表者，$A^{[\lambda]_{rs}}=A^{[\lambda]_{sr}}$ 成对出现，除此之外具有不同指标的表示互不等价。

在14.2节中已作出了与给定的表示可易的矩阵的一般形状。将其中的(14.14)和(14.19)分别用于S_{n-2}的表示(37.4)和矩阵$A^{[\lambda]}((n-1,n))$，并注意上面指出的(37.4)中各子表示之间的等价关系，便可得出

$$A^{[\lambda]}((n-1,n))=\begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ & a_r I_{rr} & & & 0 \\ & & \ddots & & \\ & & b_{rs}I_{rs}\cdots c_{rs}I_{rs} & & \\ & & \vdots \quad \ddots \quad \vdots & & \\ & & d_{rs}I_{rs}\cdots e_{rs}I_{rs} & & \\ & & & \ddots & \\ & 0 & & f_r I_{rr-1} & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{37.5}$$

其中I_{rr}、I_{rs}和I_{rr-1}分别为与$A^{[\lambda]rr}$、$A^{[\lambda]rs}$和$A^{[\lambda]rr-1}$同阶的单位矩阵。

待定参数$a,b,\cdots,f$并不是完全独立的。事实上，由$(n-1,n)^2=(1)$知

$$[A^{[\lambda]}((n-1,n))]^2=I$$

由$A^{[\lambda]}$的实正交性条件，又有

$$\widetilde{A^{[\lambda]}((n-1,n))}A^{[\lambda]}((n-1,n))=I$$

将(37.5)代入以上二式，得到

$$a_r^2=1 \tag{37.6}$$

$$f_r^2=1 \tag{37.7}$$

$$b_{rs}=-e_{rs} \tag{37.8}$$

$$c_{rs}=d_{rs} \tag{37.9}$$

$$b_{rs}^2+c_{rs}^2=1 \tag{37.10}$$

由(37.5)和(37.4)又可看出，$A^{[\lambda]}$的不可约性要求

$$c_{rs}\neq 0 \tag{37.11}$$

(2) 计算参数a、b、f

矩阵(37.5)还必须满足另外一些关系，利用这种限制足以

定出其中的参数。

考虑包含（37.5）在内的矩阵和 $\sum_{(ij)\in S_n} A^{[\lambda]}((ij))$。由于 S_n 的对换的全体是 S_n 的一个类，这个和矩阵将与所有矩阵 $A^{[\lambda]}(s)$ $(s\in S_n)$可易。按Schur引理，应有

$$\sum_{(ij)\in S_n} A^{[\lambda]}((ij))=\xi I \tag{37.12}$$

同理，对于S_{n-1}的表示$A^{[\lambda]r}$和S_{n-2}的表示$A^{[\lambda]rs'}$也有

$$\sum_{(ij)\in S_{n-1}} A^{[\lambda]r}((ij))=\xi_r I_r \tag{37.13}$$

$$\sum_{(ij)\in S_{n-2}} A^{[\lambda]rs}((ij))=\xi_{rs} I_{rs} \tag{37.14}$$

由以上三个式子和(37.4)又可得

$$\sum_{i=1}^{n-1} A^{[\lambda]}((in))=\sum_{(ij)\in S_n} A^{[\lambda]}((ij)) - \sum_{(ij)\in S_{n-1}} A^{[\lambda]}((ij))=B_n \tag{37.15}$$

$$B_n=\begin{bmatrix} \ddots & & \\ & (\xi-\xi_r)I_r & \\ & & \ddots \end{bmatrix} \tag{37.16}$$

$$\sum_{i=1}^{n-2} A^{[\lambda]}((i,n-1))=\sum_{(ij)\in S_{n-1}} A^{[\lambda]}((ij)) - \sum_{(ij)\in S_{n-2}} A^{[\lambda]}((ij))=B_{n-1} \tag{37.17}$$

$$B_{n-1}=\begin{bmatrix} \ddots & & \\ & (\xi_r-\xi_{rs})I_{rs} & \\ & & \ddots \end{bmatrix} \tag{37.18}$$

(37.17)中的$A^{[\lambda]}((i,n-1))$可用$A^{[\lambda]}((i,n))$来表示

$$A^{[\lambda]}((i,n-1)) = A^{[\lambda]}((n-1,n))A^{[\lambda]}((i,n))A^{[\lambda]}((n-1,n))$$

于是(37.17)又可写为

$$\sum_{i=1}^{n-2} A^{[\lambda]}((in)) = A^{[\lambda]}((n-1,n))B_{n-1}A^{[\lambda]}((n-1,n)) \tag{37.19}$$

将(37.15)与(37.19)两式相减，便得出矩阵(37.5)所必须满足的一个关系

$$A^{[\lambda]}((n-1,n)) = B_n - A^{[\lambda]}((n-1,n))B_{n-1}A^{[\lambda]}((n-1,n))$$

或两边右乘$A^{[\lambda]}((n-1,n))$得

$$B_nA^{[\lambda]}((n-1,n)) - A^{[\lambda]}((n-1,n))B_{n-1} = I \tag{37.20}$$

将(37.5)及(37.16)、(37.18)代入(37.20)得出

$$(\xi - 2\xi_r + \xi_{rr})a_r = 1 \tag{37.21}$$

$$(\xi - 2\xi_r + \xi_{rs})b_{rs} = 1 \tag{37.22}$$

$$(\xi - 2\xi_r + \xi_{rr-1})f_r = 1 \tag{37.23}$$

为了导出ξ、ξ_r、ξ_{rs}，对(37.12)的两边取迹

$$\sum_{(ij)\in S_n} \chi^{[\lambda]}((ij)) = \frac{n(n-1)}{2}\cdot\chi^{[\lambda]}(\text{对换}) = \xi\cdot n[\lambda]$$

上式中的$\chi^{[\lambda]}$(对换)已由(36.11)给出，从而得到

$$\xi = \sum_{k=1}^{n} \frac{\lambda_k(\lambda_k+1)}{2} - \sum_{k=1}^{n} k\lambda_k \tag{37.24}$$

同理，可由(37.13)和(37.14)看出

$$\xi_r = \xi - \lambda_r + r \tag{37.25}$$

$$\xi_{rr} = \xi_r - \lambda_r + r + 1 \tag{37.26}$$

$$\xi_{rs} = \xi_r - \lambda_s + s \tag{37.27}$$

$$\begin{aligned}\xi_{rr-1} &= \xi_r - \lambda_{r-1} + (r-1) \\ &= \xi_r - \lambda_r + r - 1\end{aligned} \tag{37.28}$$

将(37.25)—(37.28)代入(37.21)—(37.23)，可解出

$$a_r = 1 \tag{37.29}$$

$$f_r = -1 \tag{37.30}$$

$$b_{rs}=\frac{1}{(\lambda_r-\lambda_s)-(r-s)} \tag{37.31}$$

令

$$\sigma_{rs}=[(\lambda_r-\lambda_s)-(r-s)]^{-1} \tag{37.32}$$

则参数 b、c、d、e 都可用 σ 表出

$$b_{rs}=-e_{rs}=\sigma_{rs} \tag{37.33}$$

$$c_{rs}=d_{rs}=\pm\sqrt{1-\sigma_{rs}^2} \tag{37.34}$$

(3) 结果与例子

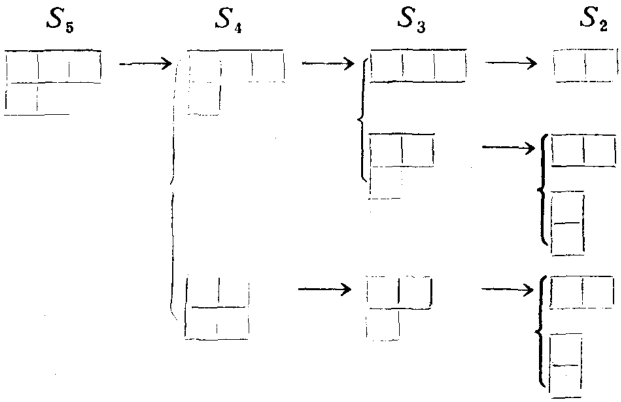
将(37.29)、(37.30)、(37.33)和(37.34)代入(37.5)，便得到矩阵 $A^{[\lambda]}((n-1,n))$ 的明显表达式

$$A^{[\lambda]}((n-1,n))=\begin{pmatrix} \ddots & & & & & 0 \\ & I_{rr} & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & \sigma_{rs}I_{rs} & \cdots & \pm\sqrt{1-\sigma_{rs}^2}I_{rs} & \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & \\ & & \pm\sqrt{1-\sigma_{rs}^2}I_{rs} & \cdots & -\sigma_{rs}I_{rs} & \\ 0 & & & & & \ddots \\ & & & & & -I_{rr-1} \end{pmatrix} \tag{37.35}$$

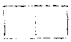
其中 σ_{rs} 由(37.32)给出，而矩阵是按(37.3)分块的。因 S_n 的所有生成元都有对换 $(i-1,i)$ 的形状，所以 $A^{[\lambda]}((i-1,i))$ 都是(37.35)型的矩阵的直和，因而我们实际上已完成了对表示 $[\lambda]$ 的标准矩阵的推导。

作为例，我们来计算 S_5 的表示[32]的标准矩阵。[32]按群链 $S_4\supset S_3\supset S_2$ 约化的分支情形已在36.5节的例2中给出，S_5 的生成元可取为(12)，(23)，(34)，(45)。为了具体写出在

表示[32]中4个生成元的矩阵，需先取定在[32]按子群链约化过程中子群的各不可约表示出现的次序。如果规定在分支律(37.1)中子群的表示$[\lambda]_r$是按r由大到小的次序出现的，则[32]的约化链可写为



其中各表示的次序由上而下。

$(12)\in S_2$，而(12)在S_2的不可约表示  和  中分别为1和-1，因而在S_5的表示[32]中(12)的矩阵为

$$A^{[32]}((12))=\begin{pmatrix}1&0&0&0&0\\0&1&0&0&0\\0&0&-1&0&0\\0&0&0&1&0\\0&0&0&0&-1\end{pmatrix}$$

$(23)\in S_3$，在S_3的不可约表示[3]和[21]中，(23)的矩阵可由(37.35)确定。在[3]中，(23)显然为1。对于[21]，在(37.3)中只出现属于情形(b)的两项

$$[21]=[21]_{21}\oplus[21]_{12}=[1]\oplus[1]$$

即有 $r=2$，$s=1$，$\lambda_r=1$，$\lambda_s=2$，$\sigma_{rs}=-\frac{1}{2}$，所以(23)在[21]中的矩阵为（已将根式的符号取为正）

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

从而由[32]的约化链可知

$$A^{[32]}((23))=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$(34)\in S_4$，在S_4的不可约表示[31]和[22]中，(34)的矩阵同样可由(37.35)算出。

$[31]=[31]_{21}\oplus[31]_{12}\oplus[31]_{11}$，可见有$r=2$，$s=1$，$\lambda_r=1$，$\lambda_s=3$，$\sigma_{rs}=-\frac{1}{3}$；$r'=s'=1$。故(34)在 [31] 中的矩阵为

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{3} & \frac{\sqrt{8}}{3} & 0 \\ \frac{\sqrt{8}}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$[22]=[22]_{22}\oplus[22]_{21}$：$r=s=2$；$r'=2$，$s'=1$，$\lambda_{r'}=\lambda_{s'}=2$。故(34)在[22]中的矩阵为

$$\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

由[32]的约化链得

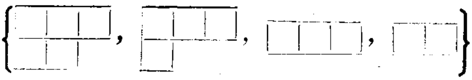
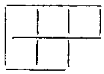
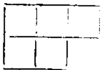
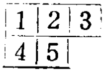
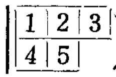
$$A^{[32]}((34))=\begin{pmatrix}-\frac{1}{3} & \frac{\sqrt{8}}{3} & 0 & 0 & 0\\ \frac{\sqrt{8}}{2} & \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

最后由(37.35)计算$A^{[32]}((45))$。由$[32]=[32]_{22}\oplus[32]_{21}\oplus[32]_{12}=[3]\oplus[21]\oplus[21]$知：$r'=s'=2$；$r=2$，$s=1$，$\lambda_r=2$，$\lambda_s=3$，$\sigma_{rs}=-\frac{1}{2}$。代入（37.35）得（根式前的符号取为正）

$$A^{[32]}((45))=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -\frac{1}{2}I & \frac{\sqrt{3}}{2}I\\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}I & \frac{1}{2}I\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

37.2 标准矩阵与标准基

标准基是指按标准矩阵变换的基。因为标准矩阵作为群链$S_n \supset S_{n-1} \supset \cdots \supset S_2$的表示是完全约化了的，因而标准基已经按这个群链中各个群的不可约表示分类了：每个基矢都按各子群的一个不可约表示变换。因此也称这样的标准基为群链$S_n \supset S_{n-1} \supset \cdots \supset S_2$的分类基。由于$S_n$的子群链不是唯一的，也可以产生其他的分类基。

为了标记标准基，只需指明它所属的各子群的不可约表示。例如，对于S_5的表示[32]，我们可以用[32]的约化链的一支，比如序列，来标记在S_5，S_4，S_3和S_2的作用下分别按不可约表示，，，和变换的基矢。而上面这个台的序列又可用的标准盘来表示：当从盘中逐次去掉较大数码所占的格子时，便得出它所表示的台的序列。所以[32]的上述这个标准基矢可记为。一般地，由分支律知，[λ]的约化链的各分支（序列）与[λ]的标准盘是一一对应的，因而可以用[λ]的标准盘来标记它的标准基。由[λ]的标准盘$\Delta^{[\lambda]}$标记的标准基矢可记为$|\Delta^{[\lambda]}\rangle$。这种记号直接表明了基矢在群算子作用下的变换性质：当从$\Delta^{[\lambda]}$中逐次去掉较大数码所占的格子时，所得到的台的序列恰好给出$|\Delta^{[\lambda]}\rangle$所属的$S_n$、$S_{n-1}$、…、$S_2$、$S_1$的不可约表示。

在34.3节中已指出，标准盘$\Delta^{[\lambda]}$可用山内恭彦符号$(r_n r_{n-1} \cdots r_1)$标记。所以，也可以用这种符号来标记不可约表

示$[\lambda]$的标准基

$$|(r_n r_{n-1}\cdots r_1)\rangle = |\Delta^{[\lambda]}\rangle \qquad (37.36)$$

其中r_i为数码i在盘$\Delta^{[\lambda]}$中所在的行数。

为了具体地写出标准矩阵，需要指明分支律中子群的各个表示的出现次序。以下我们约定，在$[\lambda]=\sum_{[r]}'[\lambda]_r$中，$[\lambda]_r$是按$r$由大到小的次序出现的。显然，这一约定相当于规定了标准基的基矢的次序：$|(r_n r_{n-1}\cdots r_1)\rangle$首先按$r_n$由大到小的顺序排列；当$r_n$相同时，则按$r_{n-1}$由大到小的次序排列；当$r_n$和$r_{n-1}$都相同时，再按$r_{n-2}$由大到小的次序排列，等等。

例如，S_5的表示$[32]$的标准基的顺序为

$$|1\rangle = |(22111)\rangle = \left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4&5\\\cline{1-2}\end{array}\right\rangle$$

$$|2\rangle = |(21211)\rangle = \left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3&5\\\cline{1-2}\end{array}\right\rangle$$

$$|3\rangle = |(21121)\rangle = \left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2&5\\\cline{1-2}\end{array}\right\rangle$$

$$|4\rangle = |(12211)\rangle = \left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&5\\\hline 3&4\\\cline{1-2}\end{array}\right\rangle$$

$$|5\rangle = |(12121)\rangle = \left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&5\\\hline 2&4\\\cline{1-2}\end{array}\right\rangle$$

在标准矩阵的最后规定中，还需选取(37.35)中根式的符号，以下约定一律取正号，这总可以通过调整标准基的相因子来实现。所以这一约定相当于对标准基矢的相对位相关系的一种规定。

在对标准基作了以上规定之后，容易写出S_n的各生成元算子对标准基的作用。假定标准基$\{|\Delta_m^{[\lambda]}\rangle\}$已按上述顺序编号，$\Delta_m^{[\lambda]}$表示$[\lambda]$的第$m$个标准基的标准盘。$S_n$的生成元的一

般形状为对换$(i-1,i)$，在此也用$(i-1,i)$代表相应的算子。现将算子$(i-1,i)$作用于基矢$|\Delta_m^{[\lambda]}>$。注意$(i-1,i)\in S_i$，而$|\Delta_m^{[\lambda]}>$在S_i下是按S_i的一个不可约表示$[\mu]$变换的，并且是$[\mu]$的一个标准基矢$|\Delta_l^{[\mu]}>$，$\Delta_l^{[\mu]}$是将盘$\Delta_m^{[\lambda]}$中被大于i的数码所占的格子去掉之后得出的标准盘。对S_i的不可约表示$[\mu]$应用结果(37.35)，不难写出矩阵$A^{[\mu]}((i-1,i))$。容易看出（见图37.1）：当$(i-1)$和i处于$\Delta_l^{[\mu]}$的同一行，则属于情形(a)；当$(i-1)$和i处于$\Delta_l^{[\mu]}$的同一列，则属于情形(c)；当$(i-1)$和i在$\Delta_l^{[\mu]}$中既不同行也不同列，则属于情形(b)。从而有

$$(i-1,i)|\Delta_l^{[\mu]}>=\begin{cases}|\Delta_l^{[\mu]}>, & (i-1)\text{和 } i \text{ 在}\Delta_l^{[\mu]}\text{中同行}\\ -|\Delta_l^{[\mu]}>, & (i-1)\text{和 } i \text{ 在}\Delta_l^{[\mu]}\text{中同列}\\ \sigma_i|\Delta_l^{[\mu]}>+\sqrt{1-\sigma_i^2}\,|(i-1,i)\Delta_l^{[\mu]}>, & \text{其他情形}\end{cases}$$

其中$\sigma_i=[(c_i-c_{i-1})-(r_i-r_{i-1})]^{-1}$，$r_i$和$c_i$分别为$i$在$\Delta_l^{[\mu]}$中所处的行数和列数，$(i-1,i)\Delta_l^{[\mu]}$表示将$\Delta_l^{[\mu]}$中的$(i-1)$，和$i$对换后所得的标准盘。回到$[\lambda]$的基矢$|\Delta_m^{[\lambda]}>$，最后得出

$$(i-1,i)|\Delta_m^{[\lambda]}>=\begin{cases}|\Delta_m^{[\lambda]}>, & (i-1)\text{和 } i \text{ 在}\Delta_m^{[\lambda]}\text{中同行}\\ -|\Delta_m^{[\lambda]}>, & (i-1)\text{和 } i \text{ 在}\Delta_m^{[\lambda]}\text{中同列}\\ \sigma_i|\Delta_m^{[\lambda]}>+\sqrt{1-\sigma_i^2}\,|(i-1,i)\Delta_m^{[\lambda]}>, & \text{其他情形}\end{cases} \tag{37.37}$$

$$\sigma_i=[(c_i-c_{i-1})-(r_i-r_{i-1})]^{-1} \tag{37.38}$$

其中r_i和c_i分别为i在$\Delta_m^{[\lambda]}$中所在的行数和列数，$(i-1,i)\Delta_m^{[\lambda]}$为将$\Delta_m^{[\lambda]}$中的$(i-1)$和$i$对换后所得出的标准盘。

结果(37.37)给出了S_n的任意生成元在不可约表示$[\lambda]$中的标准矩阵，特别地，当$i=n$时给出(37.35)。

由(37.37)写出标准矩阵是很简便的。例如，对于S_3的表

示[32]，其标准基的符号已在上面写出。将生成元(34)作用于标准基，得

$$(34)\left|\begin{array}{ccc}1&2&3\\4&5&\end{array}\right\rangle=-\frac{1}{3}\left|\begin{array}{ccc}1&2&3\\4&5&\end{array}\right\rangle+\frac{\sqrt{8}}{3}\left|\begin{array}{ccc}1&2&4\\3&5&\end{array}\right\rangle$$

$$(34)\left|\begin{array}{ccc}1&2&4\\3&5&\end{array}\right\rangle=\frac{1}{3}\left|\begin{array}{ccc}1&2&4\\3&5&\end{array}\right\rangle+\frac{\sqrt{8}}{3}\left|\begin{array}{ccc}1&2&3\\4&5&\end{array}\right\rangle$$

$$(34)\left|\begin{array}{ccc}1&3&4\\2&5&\end{array}\right\rangle=\left|\begin{array}{ccc}1&3&4\\2&5&\end{array}\right\rangle$$

$$(34)\left|\begin{array}{ccc}1&2&5\\3&&\end{array}\right\rangle=\left|\begin{array}{ccc}1&2&5\\3&4&\end{array}\right\rangle$$

$$(34)\left|\begin{array}{ccc}1&3&5\\2&4&\end{array}\right\rangle=-\left|\begin{array}{ccc}1&3&5\\2&4&\end{array}\right\rangle$$

可见(34)在[32]中的标准矩阵为

$$A^{[32]}((34))=\begin{pmatrix}-\frac{1}{3}&\frac{\sqrt{8}}{3}&0&0&0\\\frac{\sqrt{8}}{3}&\frac{1}{3}&0&0&0\\0&0&1&0&0\\0&0&0&1&0\\0&0&0&0&-1\end{pmatrix}$$

这与37.1节中所作出的一致。

基本公式(37.37)蕴涵着关于标准基矢的对称性的一个简单推论。S_n 的群元作为算子对波函数的作用，是置换其中的不同粒子的变数。设第 i 个粒子的全部变数为 q_i，则也可将标准基矢写为

$$|\varDelta_m^{[\lambda]}\rangle=\psi_{\varDelta_m^{[\lambda]}}(q_1,q_2,\cdots,q_n)\qquad(37.39)$$

而$(i-1,i)$对它的作用应为

$$(i-1,i)\psi_{\Delta_m^{[\lambda]}}(\cdots,q_{i-1},q_i,\cdots)$$
$$=\psi_{\Delta_m^{[\lambda]}}(\cdots,q_i,q_{i-1},\cdots)$$

由(37.37)的前两种情形可见：若$(i-1)$和i在$\Delta_m^{[\lambda]}$的同一行，则态$|\Delta_m^{[\lambda]}\rangle$对变数$q_{i-1}$和$q_i$是对称的；若$(i-1)$和$i$在$\Delta_m^{[\lambda]}$同一列，则态$|\Delta_m^{[\lambda]}\rangle$对变数$q_{i-1}$和$q_i$是反对称的。

例如态

$$\left|\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1&2&3&11\\ \hline 4&7&8\\ \cline{1-3} 5&9&12\\ \cline{1-3} 6&10\\ \cline{1-2}\end{array}\right\rangle$$

对粒子{1，2，3}和粒子{7，8}是对称的；而对粒子{4，5，6}和粒子{9，10}则是反对称的。

总之，状态$|\Delta_m^{[\lambda]}\rangle$对于标号相邻且处于$\Delta_m^{[\lambda]}$同一行的粒子是对称的，对于标号相邻且处于$\Delta_m^{[\lambda]}$的同一列的粒子是反对称的。

37.3 对偶表示的标准矩阵 对偶基

考虑表示$[\lambda]$及其对偶表示$[\tilde{\lambda}]$。设$[\lambda]$的标准基为

$$|\Delta_1^{[\lambda]}\rangle,\ |\lambda_2^{[\lambda]}\rangle,\ \cdots,\ |\lambda_{n[\lambda]}^{[\lambda]}\rangle \qquad (37.40)$$

以$\Delta_m^{[\tilde{\lambda}]}$表示标准盘$\Delta_m^{[\lambda]}$的转置，显然$\Delta_m^{[\tilde{\lambda}]}$是$[\tilde{\lambda}]$的一个标准盘，因而$|\Delta_m^{[\tilde{\lambda}]}\rangle$是$[\lambda]$的一个确定的标准基矢。

若盘$\Delta_m^{[\lambda]}$的Y符号为

$$(r)=(r_n,r_{n-1},\cdots,r_1) \qquad (37.41)$$

则盘$\Delta_m^{[\tilde{\lambda}]}$的$Y$符号可写为

$$(\tilde{r})=(\tilde{r}_n,\tilde{r}_{n-1},\cdots,\tilde{r}_1) \qquad (37.42)$$

其中$\tilde{r}_i$为数码i在盘$\Delta_m^{[\lambda]}$中所在的列数。$[\tilde{\lambda}]$的标准基矢也可

用$(\tilde{r})$标记

$$|(\tilde{r})\rangle = |\Delta_m^{[\tilde{\lambda}]}\rangle \tag{37.43}$$

在两个标准盘$\Delta_m^{[\lambda]}$和$\Delta_{m'}^{[\lambda]}$中，假如比 i 大的数码都占有相同的位置，若 i 在$\Delta_m^{[\lambda]}$中的行数较大，则它在$\Delta_m^{[\lambda]}$中的列数必较小。所以，若$|(r)\rangle$排在$|(r')\rangle$的前面，则$|(\tilde{r})\rangle$必排在$|(\tilde{r}')\rangle$的后面。因而，按标准顺序排好的$[\tilde{\lambda}]$的标准基为

$$|\Delta_{n[\lambda]}^{[\tilde{\lambda}]}\rangle, \cdots, |\Delta_2^{[\tilde{\lambda}]}\rangle, |\Delta_1^{[\tilde{\lambda}]}\rangle \tag{37.44}$$

注意对偶表示具有相同的维数，即有

$$n[\tilde{\lambda}] = n[\lambda] \tag{37.45}$$

$[\lambda]$ 的标准基 $\{|\Delta_m^{[\lambda]}\rangle\} = \{|(r)\rangle\}$ 和 $[\tilde{\lambda}]$ 的标准基 $\{|\Delta_m^{[\tilde{\lambda}]}\rangle\} = \{|(\tilde{r})\rangle\}$称为对偶基。

例如，S_5的对偶表示$[32]$与$[2^2 1]$的对偶基可写为

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline \ & \ & \ \\ \hline \ & \ \\ \cline{1-2}\end{array}: \left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\ \hline 4&5\\ \cline{1-2}\end{array}\right\rangle, \left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\ \hline 3&5\\ \cline{1-2}\end{array}\right\rangle, \left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\ \hline 2&5\\ \cline{1-2}\end{array}\right\rangle,$$

$$\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&5\\ \hline 3&4\\ \cline{1-2}\end{array}\right\rangle, \left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&5\\ \hline 2&4\\ \cline{1-2}\end{array}\right\rangle$$

$$\begin{array}{|c|c|}\hline \ & \ \\ \hline \ & \ \\ \hline \ \\ \cline{1-1}\end{array}: \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\ \hline 3&4\\ \hline 5\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle, \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\ \hline 2&4\\ \hline 5\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle, \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\ \hline 3&5\\ \hline 4\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle,$$

$$\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\ \hline 2&5\\ \hline 4\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle, \left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\ \hline 2&5\\ \hline 3\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle$$

为了明确对偶表示的标准矩阵之间的关系，可将生成元算子$(i-1, i)$ 作用于$|\Delta_m^{[\tilde{\lambda}]}\rangle$。利用(37.37)，有

$$(i-1,i)|\Delta_m^{[\tilde{\lambda}]}\rangle$$

$$=\begin{cases} -|\Delta_m^{[\tilde{\lambda}]}\rangle, & (i-1)\text{和 } i \text{ 在}\Delta_m^{[\lambda]}\text{中同行} \\ |\Delta_m^{[\tilde{\lambda}]}\rangle, & (i-1)\text{和 } i \text{ 在}\Delta_m^{[\lambda]}\text{中同列} \\ -\sigma_i|\Delta_m^{[\tilde{\lambda}]}\rangle+\sqrt{1-\sigma_i^2}|(i-1,i)\Delta_m^{[\tilde{\lambda}]}\rangle, & \text{其他情形} \end{cases} \tag{37.46}$$

对比（37.46）和（37.37）可以看出，为了由 $[\lambda]$ 的标准矩阵 $A^{[\lambda]}$ 得出$[\tilde{\lambda}]$的标准矩阵（对生成元$(i-1,\ i)$ 而言），只需对 $A^{[\lambda]}$进以下两步变换：1° 将$A^{[\lambda]}$对第二对角线转置（相当于颠倒基矢的顺序）；2° 改变对角元的符号。这个关系可用来简化对偶表示标准矩阵的计算。

上面的结果表明，对偶表示的标准矩阵并不满足关系(36.48)。因而也不能由标准基通过(36.46)构成总反对称态，但能够适当变换标准基，使在新基下的对偶表示的矩阵（非标准的）满足关系(36.48)。由(37.37)可见，如能使$\sqrt{1-\sigma_i^2}$前面的符号换为负号，便实现了所需的变换，即使 $A^{[\tilde{\lambda}]}((i-1,\ i))=-A^{[\lambda]}((i-1,i))$ 。为此，只需调整标准基的相对位相。令

$$\begin{cases} \psi_m^{[\lambda]}=(-1)^{\delta_m}|\Delta_m^{[\lambda]}\rangle \\ \psi_m^{[\tilde{\lambda}]}=|\Delta_m^{[\tilde{\lambda}]}\rangle \end{cases} \tag{37.47}$$

其中δ_m表将盘$\Delta_m^{[\lambda]}$变为盘$\Delta_1^{[\lambda]}$所需的置换的偶奇性指数。显然，若$(i-1,i)\Delta_m^{[\lambda]}=\Delta_{m'}^{[\lambda]}$，则有

$$\psi_{m'}^{[\lambda]}=(-1)^{\delta_{m'}}|(i-1,\ i)\Delta_m^{[\lambda]}\rangle$$

$$=-(-1)^{\delta_m}|(i-1,i)\Delta_m^{[\lambda]}\rangle$$

从而可见，在(37.37)中以 $\psi_m^{[\lambda]}$ 替换$|\Delta_m^{[\lambda]}\rangle$，则除$\sqrt{1-\sigma_i^2}$前面

符号变为负号外，无其他改变。所以，在新基下，$[\lambda]$和$[\tilde{\lambda}]$的矩阵满足关系(36.48)。于是，有总反对称态

$$\psi^{[1^n]}=\sum_m \psi_m^{[\lambda]}\varphi_m^{[\tilde{\lambda}]} \qquad ((36.46))$$

或用标准基表示

$$|[1^n]\rangle=\sum_m(-1)^{\delta_m}|\Delta_m^{[\lambda]}\rangle|\Delta_m^{[\tilde{\lambda}]}\rangle \qquad (37.48)$$

也可写为

$$|[1^n]\rangle=\sum_{(r)}(-1)^{\delta(r)}|(r)\rangle|(\tilde{r})\rangle \qquad (37.49)$$

其中$\delta_{(r)}$为将$(r)=(r_n,r_{n-1},\cdots,r_1)$的分量变为自然顺序（无递增）所需的置换的偶奇指数。显然，$\delta_{(r)}$也等于$(r_n,r_{n-1},\cdots,r_1)$中反序数对的数目。

我们看到，在用对偶表示构造总反对称态时，到底用公式(36.46)还是用(37.48)和(37.49)，实质上是由对(37.35)中的根式前面的符号的选择来决定的。如果使对偶表示取相反的符号，则应使用公式(36.46)；如果一律取正号，则应使用(37.48)和(37.49)。符号上的不便或者出现在标准矩阵的定义中，或者出现在用标准基构成总反对称态的公式中。

§38 置换群的表示的外积

38.1 外积的概念

考虑两个置换群：数码$\{1,2,\cdots,n_1\}$的置换群$S_{n_1}=S_{n_1}(1,2,\cdots,n_1)$和数码$\{n_1+1,n_1+2,\cdots,n_1+n_2\}$的置换群$S'_{n_2}=S_{n_2}(n_1+1,n_1+2,\cdots,n_1+n_2)$。这两个群，以及它们的直积$S_{n_1}\times S'_{n_2}$显然都是一个更大的置换群$S_{n_1+n_2}=S_{n_1+n_2}(1,2,\cdots,n_1+n_2)$的子群。为直观起见，可设想一个适当的模型。设有两个原子组成一个分子；第一个原子含有n_1个电子，标号为1,2,…,

n_1；第二个原子含有n_2个电子，标号为 $n_1+1, n_1+2, \cdots, n_1+n_2$；整个分子含有（$n_1+n_2$）个电子，为两个原子的电子的总和。则 S_{n_1} 是第一个原子的电子的置换群，S'_{n_2} 是第二个原子的电子的置换群，而$S_{n_1+n_2}$则是整个分子的电子的置换群。

假定两个原子的电子态已分别按 S_{n_1} 和S'_{n_2}的不可约表示分类：$\{\psi_m^{[\lambda]}(1,2,\cdots,n_1)\}$，$\{\varphi_{m'}^{[\lambda']}(n_1+1, n_1+2, \cdots, n_1+n_2)\}$。$\psi_m^{[\lambda]}$是$S_{n_1}$ 的不可约表示$[\lambda]$的基矢，$\varphi_{m'}^{[\lambda']}$ 是S'_{n_2} 的不可约表示$[\lambda']$的基矢。由它们可以构成整个分子的电子态

$$\{\psi_m^{[\lambda]}(1,2,\cdots,n_1)\varphi_{m'}^{[\lambda']}(n_1+1,n_1+2,\cdots,n_1+n_2)\}$$

现在将$[\lambda]$和$[\lambda']$ 取定，则 $\{\psi_m^{[\lambda]}\varphi_{m'}^{[\lambda']}\}$ 是群$S_{n_1}\times S'_{n_2}$的不可约表示$[\lambda]\otimes[\lambda']$的基。但$S_{n_1}\times S'_{n_2}$的这个由$\{\psi_m^{[\lambda]}\varphi_{m'}^{[\lambda']}\}$ 张成的不可约空间在群$S_{n_1+n_2}$ 下不是不变的，因而它不是 $S_{n_1+n_2}$ 的表示空间。所以，用作直积$[\lambda]\otimes[\lambda']$ 的方法并没有实现将分子的电子态按其置换群 $S_{n_1+n_2}$ 的表示分类，而只是实现了按$S_{n_1+n_2}$ 的子群$S_{n_1}\times S'_{n_2}$ 的分类。

为了由S_{n_1}的表示$[\lambda]$和S'_{n_2}的表示$[\lambda']$生成 $S_{n_1+n_2}$ 的一个表示，需要对$[\lambda]\otimes[\lambda']$ 的表示空间加以扩充。为此，只需将由$[\lambda]\otimes[\lambda']$的基矢经 $S_{n_1+n_2}$ 的任意元作用之后产生的态矢考虑在内。这样产生的态矢的一般形状为

$$\psi_m^{[\lambda]}(i_1,i_2,\cdots,i_{n_1})\varphi_{m'}^{[\lambda']}(i_{n_1+1},\cdots,i_{n_1+n_2})$$

由它们（对所有置换$\begin{pmatrix} 12\cdots n_1+n_2 \\ i_1i_2\cdots i_{n_1}+i_{n_2} \end{pmatrix}$和$m$、$m'$）所张成的空间显然在 $S_{n_1+n_2}$ 下不变。在这些态矢中，有些是显然线性相关的。事实上，如将 $i_1, i_2, \cdots, i_{n_1}$ 按由小到大的顺序重新排列后

记为 $(j_1, j_2, \cdots, j_{n_1})$，并将把后者变回前者的置换记为 s，则有

$$\begin{aligned}\psi_m^{[\lambda]}&(i_1, i_2, \cdots, i_{n_1})\\&=\hat{s}\psi_m^{[\lambda]}(j_1, j_2, \cdots, j_{n_1})\\&=\sum_l A_{lm}^{[\lambda]}(s)\psi_l^{[\lambda]}(j_1, j_2, \cdots, j_{n_1})\end{aligned}$$

即所有的 $\psi_m^{[\lambda]}$ 都可表为那些自变量的脚码是按递增的次序排列的 $\psi_l^{[\lambda]}$ 的线性组合。对于 $\varphi_{m'}^{[\lambda']}$ 也有类似的情形。因此，为了张成 $S_{n_1+n_2}$ 的不变空间，只需保留满足条件

$$i_1 < i_2 < \cdots < i_{n_1} \tag{38.1}$$

和

$$i_{n_1+1} < i_{n_1+2} < \cdots < i_{n_1+n_2} \tag{38.2}$$

的那些态矢。这些态矢的集合记作

$$\{\psi_m^{[\lambda]}(i_1, i_2, \cdots, i_{n_1})\varphi_{m'}^{[\lambda']}(i_{n_1+1}, i_{n_1+2}, \cdots, i_{n_1+n_2})\} \tag{38.3}$$

对于(38.3)中的函数的 (n_1+n_2) 个自变数在 ψ 和 φ 中的分配，有

$$\binom{n_1+n_2}{n_1}=\frac{(n_1+n_2)!}{n_1!\,n_2!}$$

种不同的选择。对于其中的每一种选择，因 m 和 m' 的取值不同，又有 $n[\lambda]\times n[\lambda']$ 个不同的 $\psi_m^{[\lambda]}\varphi_{m'}^{[\lambda']}$。所以，(38.3) 中态矢的总数为

$$n=\frac{(n_1+n_2)!}{n_1!\,n_2!}n[\lambda]n[\lambda'] \tag{38.4}$$

在这 n 个态矢中，自变量分配相同而只是 (m, m') 不同的每组态矢都是线性无关的。当 φ 与 ψ 完全独立时，不同组里的态矢

一般也是线性无关的，这时（38.3）为线性无关的；但在φ与ψ有某种联系时，不同组里的态矢可能是线性相关的，这时(38.3)也是线性相关的。

态矢集合(38.3)张成$S_{n_1+n_2}$的一个不变空间，从而确定了$S_{n_1+n_2}$的一个表示。一般地说，这个表示不但与$[\lambda]$和$[\lambda']$有关，而且与基函数$\psi_m^{[\lambda]}$和$\varphi_{m'}^{[\lambda']}$的具体形式有关。例如，因基函数的具体形式不同，(38.3)可以是无关的或相关的，从而表示的维数可以等于n或小于n。但在保证(38.3)线性无关的条件下，这个导出表示则完全由$[\lambda]$和$[\lambda']$确定（到等价），而不再与$\psi_m^{[\lambda]}$和$\varphi_{m'}^{[\lambda']}$的具体形式有关。这时，由$[\lambda]$和$[\lambda']$所生成的$S_{n_1+n_2}$的这个$n$维表示，称为$[\lambda]$和$[\lambda']$的外积，记作$[\lambda]\odot[\lambda']$。

例  $\odot$ 

 是$S_2=S_2(1,2)$的反对称表示$[1^2]$，设其基矢为$\psi(1,2)$；□是$S_1'=S_1(3)$的表示[1]，设其基矢为$\varphi(3)$。为了由这两个表示生成群$S_3=S_3(1,2,3)$的一个表示，可将S_3的6个置换作用于函数$\psi(1,2)\varphi(3)$。所得的6个函数张成S_3的一个不变空间，从而确定S_3的一个表示。由于$\psi(1,2)$的反对称性

$$(12)\psi(1,2)=\psi(2,1)=-\psi(1,2)$$

上述6个函数不是独立的。事实上，有

$$\psi(2,1)\varphi(3)=-\psi(1,2)\varphi(3)$$
$$\psi(3,1)\varphi(2)=-\psi(1,3)\varphi(2)$$
$$\psi(3,2)\varphi(1)=-\psi(2,3)\varphi(1)$$

所以，线性独立的函数只有3个，可取为

$$\{\psi(1,2)\varphi(3),\psi(1,3)\varphi(2),\psi(2,3)\varphi(1)\} \tag{38.5}$$

它们构成表示空间的一组基，满足(38.1)和(38.2)。可见，这样构成的S_3的表示 $\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}\odot\square$ 的维数为3。这时(38.4)中的 $n_1=$

$2,$, $n_2=1$，$n[\lambda]=1, n[\lambda']=1$，$n=\dfrac{(2+1)!}{2!\,1!}=3$。

在函数φ与ψ的具体形式有某种关联时，可能使上述三个基函数成为线性相关的，例如，当 $\psi(1,2)=\boldsymbol{\varphi}(1)-\boldsymbol{\varphi}(2)$时，将有

$$\psi(1,3)\boldsymbol{\varphi}(2)=\psi(1,2)\boldsymbol{\varphi}(3)+\psi(2,3)\boldsymbol{\varphi}(1)$$

这时导出的S_3的表示是2维的。这个表示不是外积 $\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}\odot\square$。在上面已排除了此类情况。

容易作出表示 $\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}\odot\square$ 在上述基下的矩阵。将S_3的生成元(12)和(23)作用于基矢，便可得出

$$A((12))=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\quad A((23))=\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\tag{38.6}$$

在保证三个基矢线性无关的条件下，不论ψ和φ的具体形状如何选取，表示 $\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}\odot\square$ 在基(38.5)的矩阵都是(38.6)。所以，表示 $\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}\odot\square$ 是由表示 $\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}$ 和 $\square$ 唯一确定的（到等价）。

以上关于外积的概念是针对S_{n_1}和S'_{n_2}的不可约表示的外积讨论的。但从上面所给的定义中不难看出，对两个原始表示的不可约性的限制是不必要的。去掉这个限制后，全部论述仍旧有效。因此，以上关于外积的定义同样适用于S_{n_1}和S'_{n_2}的可

约表示。

38.2 外积的特征标

(n_1+n_2)个自然数的叙列 $\{i_1, i_2, \cdots, i_{n_1}, i_{n_1+1}, \cdots, i_{n_1+n_2}\}$ 当满足条件(38.1)、(38.2)时，称为一个正叙列。特别地，自然叙列$\{1, 2, \cdots, n_1+n_2\}$是一个正叙列。不同的正叙列共有$(n_1+n_2)!/n_1!n_2!$个。我们可以将这些正叙列编号，并让自然叙列的编号为1。这时(38.3)中的基矢可简记为

$$|m, m', k\rangle = \psi_m^{[\lambda]}(i_1, \cdots, i_{n_1})\varphi_{m'}^{[\lambda']}(i_{n_1+1}, \cdots, i_{n_1+n_2}) \tag{38.7}$$

其中 k 为基矢中出现的正叙列$\{i_1, \cdots, i_{n_1+n_2}\}$的序号。以 q_k 表示将自然叙列变为第 k 个正叙列的置换($q_k \in S_{n_1+n_2}$)，则

$$|m, m', k\rangle = \hat{q}_k|m, m', 1\rangle \tag{38.8}$$

自然叙列的任何一个置换都可分为两步来实现：第一步先将自然叙列通过置换q_k变为正叙列，第二步分别置换所得正叙列中的前n_1个数码和后n_2个数码。令$S_{n_1}=\{t\}$，$S'_{n_2}=\{t'\}$，则上述的第二步置换总可通过适当的 t 和 t'表为

$$q_k t t' q_k^{-1}$$

这是因为，由 9.3 节中关于置换群的类的讨论可知，若 t 将 2 变为 5，则$q_k t q_k^{-1}$将 i_2 变为 i_5。总之，自然叙列的任一置换都可写为

$$(q_k t t' q_k^{-1})q_k$$

所以，群$S_{n_1+n_2}$的元总可表为

$$s = q_k t t' \tag{38.9}$$

当 t 和 t' 分别跑遍 S_{n_1} 和 S'_{n_2}，而 k 取遍所有值时，恰好得到

$n_1!n_2!\dfrac{(n_1+n_2)!}{n_1!n_2!}=(n_1+n_2)!$个元。这些元必须互不相同，否则(38.9)不能穷尽 $S_{n_1+n_2}$。由此可知

$$q_1 S_{n_1}\times S'_{n_2}=S_{n_1}\times S'_{n_2},\ q_2 S_{n_1}\times S'_{n_2},\ q_3 S_{n_1}\times S'_{n_2},\cdots$$

给出$S_{n_1+n_2}$按其子群$S_{n_1}\times S'_{n_2}$的左陪集分解。

将$S_{n_1+n_2}$的任意元作用于外积表示$[\lambda]\odot[\lambda']$的基$\{|m, m', k>\}$，有

$$\begin{aligned}
&\hat{s}|m,m',k>=\hat{s}\hat{q}_k|m,m',1>\\
&=\hat{q}_j tt'|m,m',1>=\hat{q}_j\sum_{l,l'}A^{[\lambda]}_{lm}(t)A^{[\lambda']}_{l'm'}(t')|l,l',1>\\
&=\sum_{l,l'}A^{[\lambda]}_{lm}(t)A^{[\lambda']}_{l'm'}(t')\hat{q}_j|l,l',1>\\
&=\sum_{l,l'}A^{[\lambda]}_{lm}(t)A^{[\lambda']}_{l'm'}(t')|l,l',j>
\end{aligned}$$

或写为

$$\hat{s}|m,m',k>=\sum_{i,l,l'}\delta_{ij}A^{[\lambda]}_{lm}(t)A^{[\lambda']}_{l'm'}(t')|l,l',i> \tag{38.10}$$

其中$t\in S_{n_1}$和$t'\in S'_{n_2}$以及j由下式确定

$$sq_k=q_j tt' \tag{38.11}$$

以上两式给出了表示$[\lambda]\odot[\lambda']$在基$\{|m,m',k>\}$下的矩阵。

由(38.10)可写出$[\lambda]\odot[\lambda']$的特征标

$$\begin{aligned}
\chi^{[\lambda]\odot[\lambda']}(s)&=\sum_{m,m',k}\delta_{kj}A^{[\lambda]}_{mm}(t)A^{[\lambda']}_{m'm'}(t')\\
&=\sum_k\delta_{kj}\chi^{[\lambda]}(t)\chi^{[\lambda']}(t')
\end{aligned} \tag{38.12}$$

其中的j、t、t'都是s和k的函数，通过(38.11)被s和k单值地确定。

将群$S_{n_1+n_2}$的不可约表示记作$[\Lambda]$，则总可把表示$[\lambda]\odot[\lambda']$分解为$[\Lambda]$的直和。这种分解相当于将分子的电子态(38.3)重新组合，使其按群$S_{n_1+n_2}$的表示来分类。与此相应的特征标的分解式为

$$\chi^{[\lambda]\odot[\lambda']}(s)=\sum_{[\Lambda]}a_\Lambda\chi^{[\Lambda]}(s) \tag{38.13}$$

其中a_Λ为$[\Lambda]$在$[\lambda]\odot[\lambda']$中的出现次数(重复度)。由(18.2)和(38.12)，有

$$a_\Lambda=\frac{1}{(n_1+n_2)!}\sum_s \chi^{[\lambda]\odot[\lambda']}(s)\chi^{[\Lambda]}(s)$$

$$=\frac{1}{(n_1+n_2)!}\sum_k\sum_s \delta_{kj}\chi^{[\lambda]}(t)\chi^{[\lambda']}(t')\chi^{[\Lambda]}(s)$$

对给定的k，只有使$j=k$的s才对$\sum_s$有贡献，因而$\sum_s$可写为只对满足（注意(38.11)）

$$s=q_k tt' q_k^{-1}$$

的s求和，同时去掉因子δ_{kj}。从而有

$$a_\Lambda=\frac{1}{(n_1+n_2)!}\sum_k\sum_{tt'}\chi^{[\lambda]}(t)\chi^{[\lambda']}(t')\chi^{[\Lambda]}(q_k tt' q_k^{-1})$$

$$=\frac{1}{(n_1+n_2)!}\sum_k\sum_{tt'}\chi^{[\lambda]}(t)\chi^{[\lambda']}(t')\chi^{[\Lambda]}(tt')$$

注意$\sum_k$号下的式子与k无关，而$\sum_k 1=(n_1+n_2)!/n_1!n_2!$，最后得出

$$a_\Lambda=\frac{1}{n_1!n_2!}\sum_{tt'\in S_{n_1}\times S'_{n_2}}\chi^{[\Lambda]}(tt')\chi^{[\lambda]}(t)\chi^{[\lambda']}(t')$$

$$=\frac{1}{N}(\chi^{[\Lambda]},\ \chi^{[\lambda]\otimes[\lambda']}) \tag{38.14}$$

其中N表群$S_{n_1}\times S'_{n_2}$的阶。

上式表明，$[\Lambda]$在$[\lambda]\odot[\lambda']$中的要复度恰好等于$[\lambda]\otimes$

$[\lambda']$在$[\Lambda]$中的重复度。

利用(38.13)和(38.14)可以将外积约化。这时只需知道群$S_{n_1+n_2}$、S_{n_1}和S_{n_2}的单纯特征标。事实上，上述结果表明，外积的约化完全取决于$S_{n_1+n_2}\longrightarrow S_{n_1}\times S'_{n_2}$的分支律。即有

$$[\Lambda]=\sum_{\lambda,\lambda'}a_{\Lambda,\lambda,\lambda'}[\lambda]\otimes[\lambda'] \qquad (38.15)$$

$$[\lambda]\odot[\lambda']=\sum_{\Lambda}a_{\Lambda,\lambda,\lambda'}[\Lambda] \qquad (38.16)$$

因而也可由已知的(38.15)直接写出(38.16)。

38.3 外积的约化 Littlewood规则

外积是$S_{n_1+n_2}$的可约表示。在上述的模型中，欲将整个分子的电子态进一步按对称群$S_{n_1+n_2}$的不可约表示分类，需将$[\lambda]\odot[\lambda']$的表示空间约化。这时所要求出的电子态的分类基即这个表示空间的不可约基，一般可用§20的投影算子方法作出。

为了实现这一约化，需算出(38.16)中的展开系数a，这在原则上可以利用特征标或分支律(38.15)来计算。但存在一个简单的图形方法，可用以直接写出(38.16)。下面来说明这个方法。

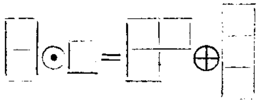
首先考虑一种特殊情形$[\lambda]\odot[1]$。这时$[\lambda']=[1]$，$n_2=1$，$[1]$是S'_1的唯一的不可约表示。(36.41)已经给出了$S_{n_1+1}\longrightarrow S_{n_1}\cong S_{n_1}\times S'_1$的分支律。由此可知，当$S_{n_1+1}$的表示$[\Lambda]$（$(n_1+1)$次杨图）去掉某一方格后化为$n_1$次杨图$[\lambda]$时，$[\Lambda]$包含$S_{n_1}\cong S_{n_1}\times S'_1$的表示$[\lambda]\otimes[1]$一次；否则$[\Lambda]$不含$[\lambda]\otimes[1]$。因而，再由(38.16)得知：$[\lambda]\odot[1]$中所含的$[\Lambda]$为由杨图$[\lambda]$按一切可能的方式加上一个方格后所生成的杨图。如以$[\lambda]^k$表示由$[\lambda]$的第$k$行加上一个方格后所生成的杨图，则上面的结

论也可表为

$$[\lambda]\odot[1]=\sum_{k}{}'[\lambda]^{k}$$

其中 $\sum\limits_{k}{}'$ 表示只对满足条件$\lambda_k<\lambda_{k-1}$的k ($k>1$)和$k=1$求和。

例 1 $[1^2]\odot[1]$



$$[1^2]\odot[1]=[21]\oplus[1^3]$$

在38.1节的例子中已写出了 $[1^2]\odot[1]$ 的基矢和矩阵，容易作出其特征标，从而验证上面的约化结果。

对于一般情形 $[\lambda]\odot[\lambda']$，其中所含的杨图$[\Delta]$ 必定是由$[\lambda]$加上$[\lambda']$的 n_2 个方格后生成的。但这样生成的杨图显然并不一定在$[\lambda]\odot[\lambda']$ 中出现。这是因为，由$[\Delta]$含有$S_{n_1}\times S'_{n_2}$的表示$[\lambda]\otimes[\lambda']$可推知$[\Delta]$必含 S_{n_1} 的表示 $[\lambda]$；反之，由$[\Delta]$含有S_{n_1} 的表示$[\lambda]$并不能推断$[\Delta]$含有$S_{n_1}\times S'_{n_2}$的表示$[\lambda]\otimes[\lambda']$。所以现在的问题是需判定，在由$[\lambda]$加上$[\lambda']$的 n_2 个方格所生成的杨图当中，哪些在 $[\lambda]\odot[\lambda']$ 中出现。有一个简单的法则，按这个法则所允许的方式将$[\lambda']$的n_2个方格逐次加到$[\lambda]$上去，所生成的杨图便给出在 $[\lambda]\odot[\lambda']$ 的约化中出现的全部杨图（有的图可能出现一次以上）。

Littlewood规则给出了上述法则：

1° 对$[\lambda']$的第一行的各方格填字母α，第二行的各方格填字母β，…；

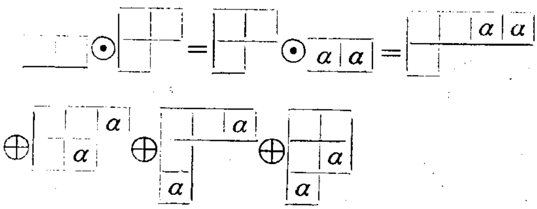
2° 依次将填有α，β，…的方格按一切可能的方式（每一步都生成杨图，且不违背 3°、4°）加到$[\lambda]$上去；

3° 填有相同字母的格加到$[\lambda]$上后不得共列；

4° 对加到$[\lambda]$上的格，自右向左逐行读出其中的字母，在读出的每一步中均需满足α的次数$\geqslant\beta$的次数$\geqslant\cdots$。

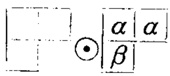
由（38.13）和（38.14）不难看出，外积$[\lambda']\odot[\lambda]$与$[\lambda]\odot[\lambda']$是$S_{n_1+n_2}$的两个等价的表示。因而在用上述规则约化外积时，将$[\lambda]$和$[\lambda']$中的哪一个杨图作为扩充的基础，是完全任意的。实际上是取较复杂的杨图作基础较为简便。

例 2 $[2]\odot[21]$



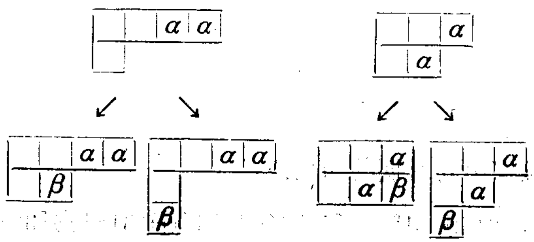
$$[2]\odot[21]=[41]\oplus[32]\oplus[31^2]\oplus[2^2 1]$$

例 3 $[21]\odot[21]$

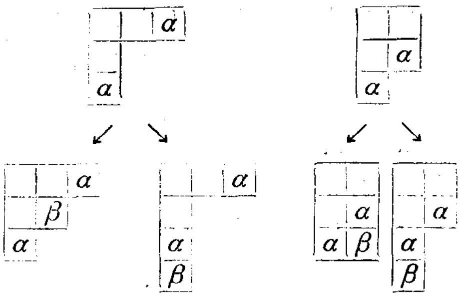


加α格：

加β格：



加 α 格：



结果： $[21]\odot[21]=[42]\oplus[41^2]\oplus[3^2]\oplus2[321]$
$\oplus[31^3]\oplus[2^3]\oplus[2^21^2]$

将外积表示的维数公式(38.4)用于约化公式(38.16)可得

$$\frac{(n_1+n_2)!}{n_1!n_2!}n[\lambda]n[\lambda']=\sum_{\Lambda}a_{\Lambda,\lambda,\lambda'}n[\Lambda] \qquad (38.17)$$

此式可用来检验约化结果的正确性。

由对偶表示的定义(36.17)可知，当将式(38.14)中的 $[\Lambda]$、$[\lambda]$、$[\lambda']$ 都换成其对偶表示时，相当于乘以因子 $\delta_{tt'}\delta_t\delta_{t'}=1$，因而与原来相同。这就证明了外积的约化系数有性质

$$a_{\tilde{\Lambda},\tilde{\lambda},\tilde{\lambda}'}=a_{\Lambda,\lambda,\lambda'} \qquad (38.18)$$

或有

$$[\tilde{\lambda}]\odot[\tilde{\lambda}']=\sum_{\Lambda}a_{\Lambda,\lambda,\lambda'}[\tilde{\Lambda}] \qquad (38.19)$$

例如，由例2中的

$$[21]\odot[2]=[41]\oplus[32]\oplus[31^2]\oplus[2^21]$$

便可直接写出其对偶的约化公式

$$[21]\odot[1^2]=[21^3]\oplus[2^21]\oplus[31^2]\oplus[32]$$

§ 39 置换羣与线性李羣的关系

39.1 线性群的张量表示

以G_n表示n阶的矩阵群$GL(n)$或$SL(n)$或$SU(n)$。矩阵群也可看作是其自身的自然表示。G_n的自然表示显然是不可约的。G_n也可看作是n维线性空间上的线性算子群。考虑m个不同的n维空间，在其中分别取基$\{u_\lambda\}$，$\{v_\mu\}$，$\cdots\{w_\nu\}$，在G_n下它们都按G_n的矩阵变换。乘积

$$u_\lambda v_\mu \cdots w_\nu \quad (\lambda, \mu, \cdots, \nu = 1, 2, \cdots, n) \tag{39.1}$$

张成一个n^m维的线性空间$\mathscr{W}$，并形成这空间的一组基。基(39.1)在G_n下显然按G_n的矩阵的m次直积变换，从而导出了G_n的一个n^m维的表示。这个表示是G_n的自然表示的m次直积，因(39.1)的变换规律与关于G_n的n维m秩逆变张量的变换规律相同，故常称为是G_n的张量表示。

另一方面，我们让置换群S_m的每个元对应空间$\mathscr{W}$上的一个线性算子，它对基矢(39.1)的作用是置换其下标。因置换下标的变换只是将一个基矢变为另一基矢，可见空间$\mathscr{W}$在S_m下也是不变的。这样，我们又在空间$\mathscr{W}$上定义了S_m的一个表示。

现在空间$\mathscr{W}$同时荷载着群G_n和S_m的表示，将这两个表示的算子分别记作$\hat{g}(g\in G_n)$和$\hat{s}(s\in S_m)$。容易验证，这两个表示是互易的

$$\hat{g}\hat{s} = \hat{s}\hat{g}, \quad (g\in G_n, \ s\in S_m) \tag{39.2}$$

按完全可约性定理，表示空间$\mathscr{W}$可以对有限群S_m约化，可将其不可约基排成如下的一些矩形，每个矩形对应于S_m的一个不可约表示。属于不可约表示$[\lambda]$的基矢矩形为(39.3)其中$n[\lambda]$和a_λ分别为表示$[\lambda]$的维数和在$\mathscr{W}$中的重复度，矩形中的每一行在S_m下都按$[\lambda]$的同一矩阵形式变换（属于$[\lambda]$的

$$\begin{array}{|llll|}
\psi^{[\lambda]}_{11}, & \psi^{[\lambda]}_{12}, & \cdots, & \psi^{[\lambda]}_{1n_{[\lambda]}} \\
\psi^{[\lambda]}_{21}, & \psi^{[\lambda]}_{22}, & \cdots, & \psi^{[\lambda]}_{2n_{[\lambda]}} \\
\cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\
\psi^{[\lambda]}_{a_\lambda 1}, & \psi^{[\lambda]}_{a_\lambda 2}, & \cdots, & \psi^{[\lambda]}_{a_\lambda n_{[\lambda]}}
\end{array} \tag{39.3}$$

同构基）。按14.2节的结果，由于(39.2)，矩形(39.3)的各个列在群G_n下将按G_n的同一个矩阵表示变换。可以将由(39.3)的每列基矢所荷载的群G_n的表示记作$D^{[\lambda]}$，其维数为a_λ。

以上只用到 14.2 节的一般结果，尚未用到在 $\mathscr{W}$ 上定义的表示的具体性质。利用这里所给表示的具体定义，可以进一步证明：

1° $D^{[\lambda]}$是不可约的，

2° $[\lambda']\neq[\lambda]$时，$D^{[\lambda']}$与$D^{[\lambda]}$不等价。

为了证明这两个重要结论，考虑与$\mathscr{W}$上所有的$\hat{s}$可易（即与S_m在$\mathscr{W}$上的表示可易）的线性算子的集合$\{\hat{T}\}$

$$\hat{T}\hat{s}=\hat{s}\hat{T}, \qquad s\in S_m \tag{39.4}$$

按14.2节中的结果可知，算子$\hat{T}$满足(39.4)的充要条件是：S_m的不可约基(39.3)中的每一列张成$\hat{T}$的一个不变子空间，且(39.3)中的各列在$\hat{T}$下的变换矩阵相同（设为$T^{[\lambda]}$）。因而，当$\hat{T}$跑遍集合$\{\hat{T}\}$时，$T^{[\lambda]}$将跑遍所有a_λ阶的方阵。a_λ阶的全矩阵的集合显然是不可约的，所以(39.3)的列所张成的子空间对于$\{\hat{T}\}$来说是不可约的。此外，对于不同$[\lambda]$的矩阵$T^{[\lambda]}$是相互独立的，彼此不可能存在相似关系，故属于不同的$[\lambda]$的$\{\hat{T}\}$的不可约子空间是不等价的。

注意G_n的表示的算子之集合$\{\hat{g}\}$是$\{\hat{T}\}$的一个子集，所以一般地不能由关于$\{\hat{T}\}$的不可约性推出关于$\{\hat{g}\}$的不可约性，对于不等价关系也有类似情形。但下面将证明，$\{\hat{T}\}$中的每个

算子$\hat{T}$都可以表为所有算子$\hat{g}$的线性组合（组合系数因$\hat{T}$不同而异）

$$\hat{T}=\sum_{g\in G}c_g\hat{g} \tag{39.5}$$

由此可知，表示（空间）的可约性和等价性对于$\{\hat{g}\}$和$\{\hat{T}\}$是相同的。因此，为了证明前面的关于$D^{[\lambda]}$的结论，只要证明(39.5)。

将算子$\hat{g}$和$\hat{T}$分别作用于基(39.1)，有

$$\hat{g}u_\lambda v_\mu\cdots w_\nu=\sum_{\lambda',\mu',\cdots,\nu'}g_{\lambda'\lambda}g_{\mu'\mu}\cdots g_{\nu'\nu}u_{\lambda'}v_{\mu'}\cdots w_{\nu'} \tag{39.6}$$

$$\hat{T}u_\lambda v_\mu\cdots w_\nu=\sum_{\lambda',\mu',\cdots,\nu'}T_{\lambda'\mu'\cdots\nu',\lambda\mu\cdots\nu}u_{\lambda'}v_{\mu'}\cdots w_{\nu'} \tag{39.7}$$

其中$g_{\lambda'\lambda}$是矩阵$g\in G_n$的阵元。$\hat{T}$满足（39.4）的充要条件为：当下标$\lambda'\lambda$，$\cdots\nu'\nu$中的各对经受任意置换时，系数$T_{\lambda'\mu'\cdots\nu',\lambda\mu\cdots\nu}$保持不变。为了简化记号，可用$l$代表一对$\lambda'\lambda$，$m$代表一对$\mu'\mu$，等等。这样可将(39.7)的系数$T$记为$T_{lm\cdots n}$，而它对于下标的任意置换是不变的。将算子方程(39.5)用它们在基(39.1)下的矩阵（元）来表示，可写为

$$T_{lm\cdots n}=\sum_{g\in G}c_g g_l g_m\cdots g_n \tag{39.8}$$

上式的意义是，任何对称张量$T_{lm\cdots n}$都可表为特殊对称张量$g_lg_m\cdots g_n$的线性组合，而g_l等是矩阵$g\in G$的阵元。这就是我们所要证明的。

现在只针对$G_n=SL(n)$来证明(39.8)，但对$G_n=GL(n)$和$SU(n)$也有同样的结论。任意的n^2维m秩张量$A_{lm\cdots n}$，作为n^{2m}个复数的数组，其全体形成一个n^{2m}维的线性空间$\mathscr{V}_A$（注意：维数中的m和n与A的下标中的m和n的含意不同）。所有的特殊对称张量$g_l\cdots g_n(g\in G_n)$的集$\{g_l\cdots g_n: g\in G_n\}$张成$\mathscr{V}_A$的一个子空间$\mathscr{V}_g$。按通常方式在$\mathscr{V}_A$中定义内积$(x,y)=$

$\sum_i x_i^* y_i$，并考虑子空间$\mathscr{V}_g$的正交补空间$\mathscr{V}_{g\perp}$。$\mathscr{V}_{g\perp}$由满足

$$\sum_{l\,m\cdots n} \gamma^*_{l\,m\cdots n} g_l g_m \cdots g_n = 0, \qquad g \in SL(n) \tag{39.9}$$

的所有矢量γ组成。在上式中对和号下的各项加以整理，将下标可以通过置换互换的项放在一起，则可把(39.9)改写为

$$\sum_{(\nu_1,\nu_2,\cdots)} \left(\sum \gamma^*_{l\,m\cdots n}\right) g_1^{\nu_1} g_2^{\nu_2} \cdots g_{n^2}^{\nu_{n^2}} = 0 \tag{39.10}$$

其中ν_i表示在m个下标当中有ν_i个取值i，显然$\sum_{i=1}^{n^2} \nu_i = m$。上式系数中的$\sum$号只对其下标由分布$(\nu_1, \nu_2, \cdots)$确定的那些$\gamma^*$求和，这些$\gamma^*$的下标可由$S_m$的置换互换。(39.10)的左边是关于$g$的矩元$g_1, g_2\cdots, g_{n^2}$的$m$次的齐次多项式。这$n^2$个变元所受的唯一限制是$(g \in SL(n))$

$$\det g = 1 \tag{39.11}$$

但这是可以去掉的，对任意满秩的n阶方阵g'，有$g' = (\det g')g$或$g_i' = (\det g')g_i$，因而对g_i成立的方程(39.10)也必然对g_i'成立（相当于在左边乘以$(\det g')^m$）。所以(39.10)可看作是关于n^2个变元g_i的恒等式，这要求它的各项系数都为零，即

$$\sum \gamma^*_{l\,m\cdots n} = 0 \tag{39.12}$$

由此可见，$\mathscr{V}_{g\perp}$由所有满足(39.12)的矢量γ组成。

对称张量$T_{lm\cdots n}$也是空间$\mathscr{V}_A$内的矢量。作T与$\mathscr{V}_{g\perp}$中的任意矢量γ的内积，并将下标可以通过S_m的置换而互换的项放在一起首先求和。由于作下标的置换时$T_{lm\cdots n}$保持不变，故可由上述各个部分和中提出，而其系数正是(39.12)。可见，所作内积必为零

$$(\gamma^*, T) = 0, \qquad \gamma \in \mathscr{V}_{g\perp} \tag{39.13}$$

上式也可记为$T \perp \mathscr{V}_{g\perp}$。由此推知

$$T \in \mathscr{V}_g \tag{39.14}$$

按$\mathscr{V}_g$的定义，(39.14)蕴含(39.8)。这就证明了(39.5)。

综上所述，我们通过由(39.5)所表示的一个代数学定理，揭示出了线性李群的表示与置换群的表示之间存在的不平常的关系。这种关系提供了另外一种（与李代数方法不同的）建立线性李群的表示理论的途径，它也可以作为对于李代数方法的一种补充。例如，在§26中已经得到构造半单李群的不可约表示的原则性的方案，特别对于典型李群，问题归结为将其张量表示约化。但在那里并没有解决如何实现张量表示约化的问题。现在这个问题可用置换群的表示来解决了。

39.2 张量表示的约化

上面已经证明，为了约化线性群 G_n 的张量表示空间 $\mathscr{W}$，只需将 $\mathscr{W}$ 作为置换群 S_m 的表示空间来进行约化。因为 S_m 是有限群，可以用§20中讲过的投影算子方法作出空间 $\mathscr{W}$（对于 S_m）的不可约基(39.3)。(39.3)的每一行张成 S_m 的一个不可约子空间，每一列张成 G_n 的一个不可约子空间，因而(39.3)也是 G_n 的不可约基。所以，空间 $\mathscr{W}$ 实现了对群 S_m 的约化时，也就自动地实现了对群 G_n 的约化。而且，在空间 $\mathscr{W}$ 中 G_n 的不可约表示 $D^{[\lambda]}$ 的维数恰为 S_m 的不可约表示 $[\lambda]$ 的重复度，而 $D^{[\lambda]}$ 的重复度则等于 $[\lambda]$ 的维数。

例 1 双电子自旋函数空间的约化

设单电子自旋($\hat{s}_z$)的本征函数为 $\psi_m(m=1,2)$，则双电子的自旋函数空间 $\mathscr{W}$ 是由基矢 $\psi_1(1)\psi_1(2)$，$\psi_1(1)\psi_2(2)$，$\psi_2(1)\psi_1(2)$，$\psi_2(1)\psi_2(2)$ 所张成的四维空间。单电子的自旋函数 $\{\psi_1, \psi_2\}$ 是群 $SU(2)$（或 $SO(3)$）的二维不可约表示 $D^{(\frac{1}{2})}$ 的不可约基，但 $D^{(\frac{1}{2})}$ 的矩阵就是 $SU(2)$ 的矩阵，因而 $\{\psi_1, \psi_2\}$ 实际上即是按 $SU(2)$ 自身（自然表示）变换。从而，$\mathscr{W}$ 是 $SU(2)$ 的二次张量表示空间。另一方面，$\mathscr{W}$ 显然也是两个电子的置换群 S_2 的表示空间。

按§20中的记法，S_2的两个投影算子可写为$p^{(1)}=\frac{1}{2}[(1)+(12)]$，$p^{(2)}=\frac{1}{2}[(1)-(12)]$。又易算出$S_2$的上述这个四维表示的特征标为$\chi=(4,2)=3(1,1)+(1,-1)$，可见其中含有对称表示3次和反称表示1次。用$p^{(1)}$作用于基矢$\psi_1(1)\psi_1(2)$以及$\psi_1(1)\psi_2(2)$、$\psi_2(1)\psi_2(2)$便得出3个独立的对称表示的不可约基；用$p^{(2)}$作用于基矢$\psi_1(1)\psi_2(2)$则得出一个反称表示的不可约基。于是，$\mathscr{W}$的四个不可约基可写为两个基矢矩形

$$\begin{array}{|c|}\hline \psi_1(1)\psi_1(2) \\ \frac{1}{2}[\psi_1(1)\psi_2(2)+\psi_2(1)\psi_1(2)] \\ \psi_2(1)\psi_2(2) \\ \hline \end{array}$$

和

$$\begin{array}{|c|}\hline \frac{1}{2}[\psi_1(1)\psi_2(2)-\psi_2(1)\psi_1(2)] \\ \hline \end{array}$$

第一个矩形的每行都按S_2的对称表示[2]变换，而列则按$SU(2)$（或$SO(3)$）的三维表示$D^{(1)}$（总自旋量子数$S=1$）变换。第二个矩形只有一个基矢，它在S_2下按反称表示$[1^2]$变换，在$SU(2)$下则按一维表示$D^{(0)}$（总自旋量子数$S=0$）变换。这在量子力学中（双电子自旋的耦合）是大家熟知的结果。

通过此例可以看出，对多电子体系的自旋波函数来说，将

它们按总自旋角动量（即按$SU(2)$的不可约表示）进行分类或按其置换对称性（即按电子置换群的不可约表示）进行分类，两者是一致的（同时实现）。

例 2 三电子自旋函数空间的约化

三电子系体的自旋波函数的空间$\mathscr{W}$由八个基矢$\psi_1(1)\psi_1(2)\psi_1(3)$，$\psi_1(1)\psi_1(2)\psi_2(3)$，…张成，是八维的($2^3=8$)。$\mathscr{W}$是$SU(2)$的三次张量表示空间，也是电子置换群$S_3$的表示空间。现将$\mathscr{W}$按$S_3$进行约化。首先，易算出$S_3$的这个表示的特征标$\chi$。将$\chi$的值与$S_3$的三个单纯特征标的值列于下表

S_3	(1)	2(123)	2(12)
$\chi^{[3]}$	1	1	1
$\chi^{[1^3]}$	1	1	-1
$\chi^{[21]}$	2	-1	0
χ	8	2	4

易见

$$\chi=4\chi^{[3]}+2\chi^{[21]}$$

这表明在$\mathscr{W}$的不可约基中共有4个[3]基，在$SU(2)$下它们按$SU(2)$的4维不可约表示$D^{(\frac{3}{2})}$变换；另外还有两组[21]基(每组含两个基矢)，在$SU(2)$下它们又分为$SU(2)$的两组不可约基，每组都按$SU(2)$的2维不可约表示$D^{(\frac{1}{2})}$变换。这与先将$\mathscr{W}$按$SU(2)$约化

$$D^{(\frac{1}{2})}\otimes D^{(\frac{1}{2})}\otimes D^{(\frac{1}{2})}=(D^{(0)}\oplus D^{(1)})\otimes D^{(\frac{1}{2})}$$
$$=D^{(\frac{1}{2})}\oplus D^{(\frac{1}{2})}\oplus D^{(\frac{3}{2})}$$

的结果是一致的。

投影算子的写法不是唯一的，它取决于不可约表示的矩阵形式的取法。例如，当表示[21]的矩阵取为(15.20)时，相应的投影算子$\hat{p}^{(21)}$（略去了下标）则由(20.22)中的$\hat{p}^{(3)}$给出。由(37.37)和(37.38)容易看出，由(15.20)所确定的矩阵正是表示[21]的标准矩阵，所以相应的投影算子(20.22)将给出S_3的不可约表示的标准基。

由(20.22)写出在这里要用到的三个投影算子

$$\hat{p}^{[3]}=\frac{1}{6}[(1)+(123)+(132)+(12)+(23)+(13)]$$

$$\hat{p}^{[21]}_{11}=\frac{1}{3}\left[(1)-\frac{1}{2}(123)-\frac{1}{2}(132)+(12)\right.$$
$$\left.-\frac{1}{2}(23)-\frac{1}{2}(13)\right]$$

$$\hat{p}^{[21]}_{12}=\frac{1}{3}\left[\frac{\sqrt{3}}{2}(123)-\frac{\sqrt{3}}{2}(132)-\frac{\sqrt{3}}{2}(23)\right.$$
$$\left.+\frac{\sqrt{3}}{2}(13)\right]$$

将$\hat{p}^{[3]}$分别作用于$\psi_1(1)\psi_1(2)\psi_1(3)$，$\psi_1(1)\psi_1(2)\psi_2(3)$，$\psi_1(1)\psi_2(2)\psi_2(3)$和$\psi_2(1)\psi_2(2)\psi_2(3)$，便得出4个独立的[3]基，可写为一个4行1列矩形。将$\hat{p}^{[21]}_{11}$分别作用于$\psi_1(1)\psi_1(2)\psi_2(3)$和$\psi_1(1)\psi_2(2)\psi_2(3)$得出两个独立的$\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}$基；再将$\hat{p}^{[21]}_{12}$作用于这两个矢量，又得出两个独立的$\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}$基；这4个标准基可写为一个2行2列的矩形。这样，八维空间$\mathscr{W}$的八个不可约基构成两个矩形，每个矩形的行和列分别按S_3和$SU(2)$的不

[3]

$$\boxed{1\,|\,2\,|\,3}$$

$D^{(\frac{3}{2})}$

M	
$\frac{3}{2}$	$\psi_1(1)\psi_1(2)\psi_1(3)$
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}[\psi_1(1)\psi_1(2)\psi_2(3)+\psi_1(1)\psi_2(1)\psi_1(3)+\psi_2(1)\psi_1(2)\psi_1(3)]$
$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}[\psi_1(1)\psi_2(2)\psi_2(3)+\psi_2(1)\psi_1(2)\psi_2(3)+\psi_2(1)\psi_2(2)\psi_1(3)]$
$-\frac{3}{2}$	$\psi_2(1)\psi_2(2)\psi_2(3)$

[21]

$D^{(\frac{1}{2})}$

M	$\begin{array}{\|c\|c\|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline\end{array}$	$\begin{array}{\|c\|c\|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline\end{array}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}[2\psi_1(1)\psi_1(2)\psi_2(3) - \psi_1(1)\psi_2(2)\psi_1(3) - \psi_2(1)\psi_1(2)\psi_1(3)]$,	$\frac{1}{\sqrt{3}}[-\psi_1(1)\psi_2(2)\psi_1(3) + \psi_2(1)\psi_1(2)\psi_1(3)]$
$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{6}[\psi_1(1)\psi_2(2)\psi_2(3) + \psi_2(1)\psi_1(2)\psi_2(3) - 2\psi_2(1)\psi_2(2)\psi_1(3)]$,	$\frac{1}{2\sqrt{3}}[-\psi_1(1)\psi_2(2)\psi_2(3) + \psi_2(1)\psi_1(2)\psi_2(3)]$

可约表示变换。在写出的矩形中，已经标明了基矢的变换性质，左边的数字是波函数的总自旋的投影量子数 M_S。这里顺便指出，以上基矢恰为 $\hat{S}_z$ 的本征函数这一点是不足怪的。因为我们选取的被投影算子 p 作用的原始函数是 $\hat{S}_z$ 的本征函数（这并不是必需的），而 $\hat{S}_z$ 与全部投影算子可易，所以原始函数被 p 算子作用后仍为 $\hat{S}_z$ 的属于原本征值的本征态。正是考虑到这一点，我们在作具体运算之前就知道，例如对于 $p^{[3]}$所取的 4 个函数，在被$p^{[3]}$作用后得出的函数必定是线性独立的，因为这 4 个函数显然是 $\hat{S}_z$ 的属于不同本征值$\left(M_S=\frac{3}{2},\ \frac{1}{2},\ -\frac{1}{2},\ -\frac{3}{2}\right)$的本征函数。

如果用量子数(S，M_S)来标记不可约基的旋转对称性，用 Y 符号(r)标记其置换对称性，则可将不可约基记作 $|S, M_S; (r)>$。这时上面的两个基矢矩形可写成

$$\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2};\quad (111)\right>$$

$$\left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2};\quad (111)\right>$$

$$\left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2};\quad (111)\right>$$

$$\left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2};\quad (111)\right>$$

和

$\left\|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \quad (211)\right\rangle$	$\left\|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \quad (121)\right\rangle$
$\left\|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \quad (211)\right\rangle$	$\left\|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \quad (121)\right\rangle$

现在来考虑在群G_n的张量表示空间$\mathscr{W}$作为群S_m的表示进行约化时，S_m的哪些不可约表示$[\lambda]$会在其中出现。在例2中，$G=SU(2)$，$S_m=S_3$，S_3的三个不可约表示[3]、[21]、$[1^3]$在约化中出现两个：[3]和[21]。$[1^3]$不能在其中出现的原因很明显：若含有$[1^3]$，则有标准基$\left|\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array}\right\rangle$，但由37.2节末尾的讨论得知，这个函数对于三个电子的变量是反对称的，由于只有两个单电子态，这样的函数（可写为由单电子态构成的一个行列式）必为零。

为了对上述问题作出一般的回答，这里将使用S_m的一组特殊的投影算子。在§35中，曾引入了杨算子(35.1)，它是$S_m(S_n)$的群元的线性组合，即S_m的群代数的元。作为S_m在空间$\mathscr{W}$上的表示，S_m的每个元s表现为$\mathscr{W}$上的线性算子$\hat{s}$，因而杨算子(35.1)也表现为$\mathscr{W}$上的线性算子（群代数的表示）

$$\hat{Y}_\Sigma=(\sum\hat{p})(\sum\delta_q\hat{q})=\sum_{pq}\delta_q\hat{p}\hat{q} \tag{39.15}$$

在35.2节中已经证明，群代数的元

$$\{h_1Y_i^{[\lambda]},\ h_2Y_i^{[\lambda]},\ \cdots,\ h_{n[\lambda]}Y_i^{[\lambda]}\} \tag{39.16}$$

在$s(\in S_m)$的左乘下按S_m的不可约表示$[\lambda]$变换（非标准矩阵）。由同态关系推知，算子组

$$\{\hat{h}_1\hat{Y}_i^{[\lambda]},\ \hat{h}_2\hat{Y}_i^{[\lambda]},\ \cdots,\ \hat{h}_{n[\lambda]}\hat{Y}_i^{[\lambda]}\} \tag{39.17}$$

在$\hat{s}$的左乘下将按$[\lambda]$的同一组矩阵变换。因而，若Ψ为空间

$\mathscr{W}$中的任意矢量，则矢量组

$$\{\hat{h}_1\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi, \ \hat{h}_2\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi, \ \cdots, \ \hat{h}_{n[\lambda]}\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi\} \qquad (39.18)$$

在算子 $\hat{s}$ 的作用下也按 S_m 的不可约表示 $[\lambda]$ 的同一组矩阵变换。另一方面，按不可约表示变换的矢量组，或全为零，或线性无关（请读者证明）。从而可知，只要（39.18）中的一个矢量不为零，它就构成 S_m 的一组$[\lambda]$不可约基。

为了求得其他的$[\lambda]$不可约基，可以变动(39.18)中的Ψ，例如变为Ψ'，则又得出一组基。这两组基的关系只能是这样的：或者相互无关，从而给出两个独立的$[\lambda]$不可约子空间；或者只差一个比例常数，从而实质上是同一组基。这一点可证明如下。

设$\{u_1, \ u_2, \ \cdots, \ u_n\}$和$\{v_1, \ v_2, \ \cdots, \ v_n\}$是按任意群$G$的同一不可约矩阵表示$A(g)$变换的两组矢量。由不可约表示的定义容易证明（请读者作出），这两组矢量张成的两个子空间或者完全重合，或者没有公共的非零矢量。这后一种情况即是两个子空间（两组矢量）线性无关。如果不是这种情况，即两组矢量张成同一个空间，这时存在由$\{u_i\}$到$\{v_j\}$的基矢变换矩阵S

$$v_i = \sum_j S_{ji} u_j$$

用 $\hat{g}$ 作用此式的两边，得

$$\sum_l A_{li}(g) v_l = \sum_j S_{ji} \sum_k A_{kj}(g) u_k$$

上式中的 v_l 用第一式代入

$$\sum_{l,k} A_{li}(g) S_{kl} u_k = \sum_{j,k} S_{ji} A_{kj}(g) u_k$$

从而有

$$\sum_l S_{kl} A_{li}(g) = \sum_j A_{kj}(g) S_{ji}$$

或

$$SA(g) = A(g)S, \qquad g \in G$$

Schur 引理要求上式中的 S 为单位矩阵的倍数，即

$$S_{ij}=c\delta_{ij}$$

于是得到

$$v_i=cu_i,\qquad i=1,2,\cdots,n$$

由上述论断可知，为了使 Ψ' 产生出独立于(39.18)的新基，只需使一个（任选）对应的基矢（例如 $\hat{h}_1\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi$ 和 $\hat{h}_1\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi'$）彼此独立就够了。

让 Ψ 跑遍 $\mathscr{W}$，得出 a_λ 个独立的 $\hat{h}_1Y_i^{[\lambda]}\Psi$：$\hat{h}_1Y_i^{[\lambda]}\Psi_1$，$\hat{h}_1\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi_2$，…，$\hat{h}_1\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi_{a_\lambda}$。从而由(39,18)又得出 a_λ 组独立的 $[\lambda]$ 基，形成一个基矢矩形(39.3)

$$\begin{array}{|llll|}\hat{h}_1\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi_1, & \hat{h}_2\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi_1, & \cdots, & \hat{h}_{n[\lambda]}\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi_1\\ \hat{h}_1\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi_2, & \hat{h}_2\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi_2, & \cdots, & \hat{h}_{n[\lambda]}\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi_2\\ & \cdots\cdots\cdots & & \\ \hat{h}_1\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi_{a_\lambda}, & \hat{h}_2\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi_{a_\lambda}, & \cdots, & \hat{h}_{n[\lambda]}\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi_{a_\lambda}\end{array}\qquad(39.19)$$

矩形(39.19)的每个行都是群 S_m 的不可约表示$[\lambda]$的不可约基（非标准基），每个列都是线性群 G_n 的不可约表示 $D^{[\lambda]}$的不可约基。上面的讨论表明，算子组(39.17)与§20 中用不可约矩阵元定义的（广义）投影算子 $\{\hat{p}_{i1}^{[\lambda]},\ \hat{p}_{i2}^{[\lambda]},\ \cdots,\ \hat{p}_{i\,n[\lambda]}^{[\lambda]}\}$，两者的作用是相同的，差别只在于所得出的不可约基的变换矩阵可能不同（彼此等价）。所以，(39.17) 也是 S_m 的一种投影算子。

由基矢矩形(39.19)所张成的 $\mathscr{W}$ 的子空间是由$[\lambda]$唯一确定的，与约化的具体方法无关，可记为 $\mathscr{W}^{[\lambda]}$。但 $\mathscr{W}^{[\lambda]}$的约化形式不是唯一的，唯一确定的只是等价不可约子空间的个数。例如，当(39.19)中 $\hat{Y}_i^{[\lambda]}$ 的下标（$i=1,2,\cdots,n[\lambda]$）取不同值时，矩形中对应的行（列）空间一般是不同的，但整个矩形张成的空间都是$\mathscr{W}^{[\lambda]}$。

通常给出的是 $\mathscr{W}^{[\lambda]}$ 的另一种不同于(39.19)的更为有用的

约化形式。(39.19)的第 l 列张成的子空间，显然可写为

$$\hat{h}_l\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W}=\{\hat{h}_l\hat{Y}_i^{[\lambda]}\Psi : \Psi\in\mathscr{W}\}$$

再对 l 进行组合，并注意(39.16)是 S_m 的群代数 $\mathscr{R}$ 的极小左理想 $\mathscr{R}Y_i^{[\lambda]}$ 的一组基，则可写

$$\mathscr{W}^{[\lambda]}=\hat{\mathscr{R}}\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W}$$

其中 $\hat{\mathscr{R}}$ 为将 $\mathscr{R}$ 中的群元 s 换为算子 $\hat{s}$ 所得的算子代数。再将上式对 i 进行线性组合，由于 $\mathscr{W}^{[\lambda]}$ 与 i 无关，结果仍为 $\mathscr{W}^{[\lambda]}$。即有

$$\mathscr{W}^{[\lambda]}=\left(\sum_{i=1}^{n[\lambda]}\oplus\hat{\mathscr{R}}\hat{Y}_i^{[\lambda]}\right)\mathscr{W} \tag{39.20}$$

（见§35 的基本定理：诸 $\mathscr{R}Y_i^{[\lambda]}$ 线性无关）。另一方面，可以与§35 同样地将 $\mathscr{R}$ 按其极小右理想 $\bar{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{R}$ 进行分解，并可建立一套与§35 完全平行的理论。其中

$$\bar{Y}_i^{[\lambda]}=\left(\sum_q\delta_q q\right)\left(\sum_p p\right) \tag{39.21}$$

是由$[\lambda]$的第 i 的标准盘产生的右杨算子，p 与 q 的含意同前。$\bar{Y}_i^{[\lambda]}$ 具有与 $Y_i^{[\lambda]}$ 相似的性质和作用。在 16.3节中已指出，对给定的 $[\lambda]$，$\mathscr{R}$ 的不可约基

$$\{p_{ij}^{[\lambda]} : i,\ j=1,2,\cdots,n[\lambda]\} \tag{39.22}$$

张成 $\mathscr{R}$ 的一个双侧理想。因为属于不同的$[\lambda]$的不可约基（不等价的）是线性独立的，所以由(39.22)所张成的左理想必与 $\sum_{i=1}^{n[\lambda]}\oplus\mathscr{R}Y_i^{[\lambda]}$ 重合。同理，(39.22)张成的右理想与 $\sum_{i=1}^{n[\lambda]}\oplus\bar{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{R}$ 重合。于是有

$$\sum_{i=1}^{n[\lambda]}\oplus\bar{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{R}=\sum_{i=1}^{n[\lambda]}\oplus\mathscr{R}Y_i^{[\lambda]} \tag{39.23}$$

将 S_m 的元换成算子后上式仍成立（代数同态），于是(39.20)又可写为

$$\mathscr{W}^{[\lambda]}=\left(\sum_{i=1}^{n[\lambda]}\oplus\hat{\bar{Y}}_i^{[\lambda]}\hat{\mathscr{R}}\right)\mathscr{W}$$

显然

$$\hat{\mathscr{R}}\mathscr{W}=\mathscr{W} \tag{39.24}$$

所以又得

$$\mathscr{W}^{[\lambda]}=\sum_{i=1}^{n[\lambda]}\oplus\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W} \tag{39.25}$$

其中

$$\hat{Y}_i^{[\lambda]}=(\sum_q\delta_q\hat{q})(\sum_p\hat{p})=\sum_{p,q}\delta_q\hat{q}\hat{p} \tag{39.26}$$

由于(39.2)，群G_n的算子$\hat{g}$也与$\hat{Y}_i^{[\lambda]}$对易，从而每个子空间$\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W}$都在$G_n$下不变，即是$G_n$的表示空间。对于$\bar{Y}$，容易看出，也具有$Y$的性质(35.5)，从而有

$$\bar{Y}_i^{[\lambda]}=h_i\bar{Y}_1^{[\lambda]}h_i^{-1} \tag{39.27}$$

h_i是将$[\lambda]$的第一个标准盘变为第i个标准盘的置换。换为算子形式为

$$\hat{Y}_i^{[\lambda]}=\hat{h}_i\hat{Y}_1^{[\lambda]}\hat{h}_i^{-1} \tag{39.28}$$

由此可推断，作为群G_n的表示空间，所有的$\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W}(i=1,2,\cdots,n[\lambda])$是彼此等价的。事实上，在空间$\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W}$和$\hat{Y}_1^{[\lambda]}\mathscr{W}$之间存在一一的线性映射$\hat{f}$

$$\hat{f}(\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi)=\hat{Y}_i^{[\lambda]}\hat{h}_i\Psi=\hat{h}_i\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi \tag{39.29}$$

而且

$$\hat{g}\hat{f}=\hat{f}\hat{g},\qquad g\in G_n \tag{39.30}$$

又，已知$\mathscr{W}^{[\lambda]}$含有$n[\lambda]$个G_n的不可约子空间（由$\mathscr{W}^{[\lambda]}$的定义知），于是(39.25)要求其中的$n[\lambda]$个等价子空间必定不可约。

总之，(39.25)表明，$\mathscr{W}^{[\lambda]}$可分解为G_n的$n[\lambda]$个等价的不可约表示空间$\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W}(i=1,2,\cdots,n[\lambda])$的直和。

设$\{\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_1, \hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_2, \cdots, \hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_{a_\lambda}\}$为$\hat{Y}_1^{[\lambda]}\mathscr{W}$的一组基，则由(39.29)可知，$\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W}$中的相应的等价基（按$G_n$的同一矩阵表示变换）为$\{\hat{h}_i\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_1, \hat{h}_i\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_2, \cdots, \hat{h}_i\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_{a_\lambda}\}$。将上述每一组基写成一列，又得到$\mathscr{W}^{[\lambda]}$的一个基矢矩形($\hat{h}_1=1$)

$$\begin{array}{|cccc|}\hat{h}_1\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_1 & \hat{h}_2\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_1 & \cdots & \hat{h}_{n[\lambda]}\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_1 \\ \hat{h}_1\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_2 & \hat{h}_2\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_2 & & \hat{h}_{n[\lambda]}\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_2 \\ & \cdots\cdots & & \\ \hat{h}_1\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_{a_\lambda} & \hat{h}_2\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_{a_\lambda} & & \hat{h}_{n[\lambda]}\hat{Y}_1^{[\lambda]}\Psi_{a_\lambda}\end{array} \tag{39.31}$$

其中的行和列分别按S_m的不可约表示$[\lambda]$和G_n的不可约表示$D^{[\lambda]}$变换。注意，在(39.27)中的$\hat{Y}_1^{[\lambda]}$的下标1是任意取定的，如果下标取定为l，则(39.27)对$\hat{Y}_l^{[\lambda]}$同样成立，只要将h_i理解为是把第l个标准盘变为第i个标准盘的置换。所以，(39.31)中的$\hat{Y}_1^{[\lambda]}$的下标是可以取1，2，…，$n[\lambda]$中的任一个值的。由此可见，(39.31)与(39.19)的不同只在于用$\hat{Y}$代替了Y。

关于表示空间$\mathscr{W}$的构造的最后一个问题是：对给定的G_m和S_m，$[\lambda]$取哪些值的(39.25)或基矢矩形(39.31)在表示空间$\mathscr{W}$的约化中出现？下面来解决此问题。

由于(39.25)中的各子空间彼此等价，它们只能是：或者全为零（空间），或者全不为零。因而$\mathscr{W}^{[\lambda]}$在$\mathscr{W}$的约化中出现的充要条件为：对某个a，$\hat{Y}_a^{[\lambda]}\mathscr{W}\neq\{0\}$。这个条件显然又可表为：至少存在一个$\Psi_a\in\mathscr{W}$，使得

$$\hat{Y}_a^{[\lambda]}\Psi_a\neq 0 \tag{39.32}$$

任一盘的水平置换，总可写为这个盘的各个行内的数码的

置换的乘积。属于不同行的置换，由于所含的数码不同，显然彼此可易，且除恒等置换外彼此不等。所以，盘的水平置换群等于各个行的置换群的直积。与此相应地有

$$P=\sum_{p} p=\prod_{i}(\sum_{p_i} p_i) \tag{39.33}$$

同理，盘的垂直置换群等于各个列的置换群的直积。相应地有

$$Q=\sum_{q}\delta_q q=\prod_{j}(\sum_{q_j}\delta_{q_j} q_j) \tag{39.34}$$

上两式中，i 是行标，p_i 表第 i 行中数码的置换；j 是列标，q_j 表第 j 列中数码的置换。由这盘产生的 Y 算子可写为

$$\hat{Y}^{[\lambda]}=\hat{Q}\hat{P} \tag{39.35}$$

$$\hat{P}=\prod_{i}(\sum_{p_i}\hat{p}_i) \tag{39.36}$$

$$\hat{Q}=\prod_{j}(\sum_{q_j}\delta_{q_j}\hat{q}_j) \tag{39.37}$$

为了下面叙述方便，现将 G_n 的自然表示的基 $\{u_\lambda\}$、$\{v_\mu\}$、…、$\{w_\nu\}$ 改记为 $\{\varphi_\lambda(1)\}$、$\{\varphi_\mu(2)\}$、…、$\{\varphi_\nu(m)\}$，则空间 $\mathscr{W}$ 的基(39.1)可写为

$$\{\varphi_\lambda(1)\varphi_\mu(2)\cdots\varphi_\nu(m):\lambda,\ \mu,\ \cdots,\ \nu=1,2,\cdots,n\} \tag{39.38}$$

$\mathscr{W}$ 中的任意矢量 Ψ 是(39.38)中的矢量对下标的组合，可写为

$$\Psi(1,2,\cdots,m)=\sum_{\lambda,\mu,\cdots,\nu} c_{\lambda,\mu,\cdots,\nu}\varphi_\lambda(1)\varphi_\mu(2)\cdots\varphi_\nu(m) \tag{39.39}$$

而作为 S_m 在 $\mathscr{W}$ 上的表示，置换

$$s=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & m\\ s_1 & s_2 & \cdots & s_m\end{pmatrix}$$

对 Ψ 的作用则可明显地表为

$$\hat{s}\Psi(1,2,\cdots,m)=\Psi(s_1,s_2,\cdots,s_m) \tag{39.40}$$

对任意台 $[\lambda]$，总有一个形如

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|}\hline 1 & 5 & 8 & 11 & 13 & 14 & 15 \\ \hline 2 & 6 & 9 & 12 \\ \cline{1-4} 3 & 7 & 10 \\ \cline{1-3} 4 \\ \cline{1-1}\end{array} \tag{39.41}$$

的标准盘，其中的数码是按递增的次序逐列地由上到下排列的。对每个$[\lambda]$，我们选取这样一个标准盘，将它产生的Y算子记为$\hat{Y}_a^{[\lambda]}$。

当$[\lambda]$的行数$r \leqslant n$时，在(39.39)中存在一个（与形如(39.41)的标准盘相应的）形如下式的特殊基矢Ψ_a

$$\begin{aligned}&\varphi_1(1)\varphi_1(5)\varphi_1(8)\varphi_1(11)\varphi_1(13)\varphi_1(14)\varphi_1(15)\\&\varphi_2(2)\varphi_2(6)\varphi_2(9)\varphi_2(12)\\&\varphi_3(3)\varphi_3(7)\varphi_3(10)\\&\varphi_4(4)\end{aligned} \tag{39.42}$$

这个基矢的特点是：其中的因子$\varphi_i(k)$的下标i等于数码k在盘中所处的行数。当$r>n$时，因φ的下标不可能超过n，即不存在φ_r，故不存在形如(39.42)的基矢。对于Ψ_a，当以相应盘的行置换作用时，由于被置换的各个φ的下标相同，结果显然不变（对比(39.41)和(39.42)）。于是有

$$\hat{P}\Psi_a = \prod_i (\lambda_i !)\Psi_a \tag{39.43}$$

其中λ_i是$[\lambda]$的i分量，$\prod_i(\lambda_i !)$是所取盘的水平置换群的阶。以b_j表示盘的第j列的格子数，用(39.37)作用Ψ_a，则每个列置换群的因子$(\sum_{q_j}\delta_{q_j}\hat{q}_j)$产生一个由该列中的$\varphi$形成的行列式

$$\Psi_{1\cdots 2b_j}(l_j, l_j+1, \cdots, l_j+b_j) = \begin{vmatrix}\varphi_1(l_j), \varphi_1(l_j+1), \cdots, \varphi_1(l_j+b_j)\\ \varphi_2(l_j), \varphi_2(l_j+1), \cdots, \varphi_2(l_j+b_j)\\ \cdots \quad \cdots \\ \varphi_{b_j}(l_j), \varphi_{b_j}(l_j+1), \cdots, \varphi_{b_j}(l_j+b_j)\end{vmatrix} \tag{39.44}$$

而 $\hat{Q}\Psi_a$ 等于这些行列式之积。其中

$$\begin{cases} l_1=1 \\ l_2=b_1+1 \\ l_3=b_1+b_2+1 \\ l_j=b_1+b_2+\cdots+b_{j-1}+1 \end{cases} \tag{39.45}$$

总之得出

$$\hat{\hat{Y}}_a^{[\lambda]}\Psi_a=\prod_i(\lambda_i!)\cdot\prod_j\Psi_{12\cdots b_j}(l_j,l_j+1,\cdots,l_j+b_j) \tag{39.46}$$

(39.44) 中含有 $b_j!$ 个项，它们由 $\varphi_1(l_j)\varphi_2(l_j+1)\cdots\varphi_{b_j^*}(l_j+b_j)$对下标（或$\varphi$的序号）的所有置换得出，显然是线性独立的。因而(39.44)不等于零，(39.46)也不等于零。即有

$$\hat{\hat{Y}}_a^{[\lambda]}\Psi_a\neq 0 \tag{(39.32)}$$

这就证明了$[\lambda]$的行数 $r\leqslant n$ 的$\mathscr{W}^{[\lambda]}$必在$\mathscr{W}$的约化中出现。

再考虑 $r>n$ 的情况。将$\hat{\hat{Y}}_a^{[\lambda]}$中的算子$\hat{Q}$作用于(39.38)中的任一基矢，得

$$\Phi=\hat{Q}\varphi_\lambda(1)\varphi_\mu(2)\cdots\varphi_\nu(r)\cdots$$

因φ的下标只有 n 个不同值，故在上式中列出的 r 个φ的下标当中至少有两个是相同的，例如可假定$\varphi(l)$和$\varphi(l')$的下标相等。将对换 (l,l') 作用于 Φ，则有（这里同时用 (l,l') 表示算子）

$$(l,l')\Phi=\Phi$$

另一方面，(l,l') 是盘中第一列的两个数码的对换，属于垂直置换，故有（见(35.7)）

$$(l,l')Q=-Q$$

从而又得

$$(l,l')\Phi=-\Phi$$

所以必须

$$\Phi=-\Phi \qquad \text{或} \qquad \Phi=0$$

这表明 $\hat{Q}$ 将 $\mathscr{W}$ 的每个基矢都变成零。因而，$\hat{Q}$ 将 $\mathscr{W}$ 中的任意矢量，特别地也将 $\hat{P}\Psi$ 变成零

$$\hat{Q}(\hat{P}\Psi)=0$$

即有

$$\hat{\hat{Y}}{}_{a}^{[\lambda]}\Psi=0, \qquad \Psi\in\mathscr{W} \tag{39.47}$$

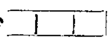
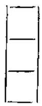
这就证明了，当 $[\lambda]$ 的行数 $r>n$ 时，$\mathscr{W}^{[\lambda]}$ 不可能在 $\mathscr{W}$ 的约化中出现。

综上所述，关于 G_n 的张量表示空间 $\mathscr{W}$ 的构造，有以下基本结果

$$\mathscr{W}=\sum_{\substack{[\lambda]\\(r\leqslant n)}}\oplus\mathscr{W}^{[\lambda]} \tag{39.48}$$

或

$$\mathscr{W}=\sum_{\substack{[\lambda]\\(r\leqslant n)}}\sum_{i=1}^{n[\lambda]}\oplus\hat{\hat{Y}}{}_{i}^{[\lambda]}\mathscr{W} \tag{39.49}$$

例如，前面讨论过的例2，相当于 $G_n=SU(2)$ 及 $S_m=S_3$ 的特殊情形。在 S_3 的三个台 、、 当中，只有前两个满足 $r\leqslant n=2$。所以，这时(39.49)化为

$$\mathscr{W}=\hat{\hat{Y}}_{\begin{smallmatrix}1&2&3\end{smallmatrix}}\mathscr{W}\oplus\hat{\hat{Y}}_{\begin{smallmatrix}1&2\\3&\end{smallmatrix}}\mathscr{W}\oplus\hat{\hat{Y}}_{\begin{smallmatrix}1&3\\2&\end{smallmatrix}}\mathscr{W} \tag{39.50}$$

此处 $\mathscr{W}$ 是由基 $\{\varphi_\lambda(1)\varphi_\mu(2)\varphi_\nu(3):\lambda,\mu,\nu=1,2\}$ 张成的8维空间。(39.50)中的三个子空间是 $SU(2)$ 的三个不可约子空

间，且后两个是等价的。如果用分割记号$[\lambda]$来标记$SU(2)$的不可约表示，则与(39.50)相应的表示分解式应写为

$$D=D^{[3]}\oplus D^{[21]}\oplus D^{[21]} \tag{39.51}$$

但是在本节以前，对$SU(2)$的不可约表示，我们是用半整数J（首权）来标记的。所以还要确定(39.51)中的不可约表示的首权。在本例中，表示的权就是总自旋的投影量子数M_s，$\mathscr{W}$的8个基矢都是M_s有确定值的矢量。由于$SU(2)$的生成元$\hat{S}_z$（即嘉当子代数的算子）与$\hat{Y}$可易，$\mathscr{W}$的上述基在被$\hat{Y}$作用后其权M_s不变。

$D^{[3]}$的表示空间中有非零矢($\hat{Y}_a^{[\lambda]}\Psi_a$)

$$\hat{Y}_{\boxed{1\,2\,3}}\quad \varphi_1(1)\varphi_1(2)\varphi_1(3)$$

此矢量属于权$M_s=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}=\frac{3}{2}$。这个空间中不可能有属于更高的权的矢量，因而$\frac{3}{2}$是表示$D^{[3]}$之首权。于是有

$$D^{[3]}=D^{\left(\frac{3}{2}\right)} \tag{39.52}$$

在$D^{[21]}$的第二个表示空间中，有非零矢量

$$\hat{Y}_{\begin{smallmatrix}1&2\\3\end{smallmatrix}}\quad \begin{matrix}\varphi_1(1)\varphi_1(3)\\ \varphi_2(2)\end{matrix}$$

它显然属于权$M_s=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}=\frac{1}{2}$。在$\mathscr{W}$中比$\begin{matrix}\varphi_1(1)\varphi_1(3)\\ \varphi_2(2)\end{matrix}$具有更高权的基矢只有$\begin{matrix}\varphi_1(1)\varphi_1(3)\\ \varphi_1(2)\end{matrix}$，但因后者被$\hat{Y}_{\begin{smallmatrix}1&2\\3\end{smallmatrix}}$变成零，故属于此权的矢量不可能在这个表示空间中出现。因而

$\frac{1}{2}$必为$D^{[21]}$的首权，可写

$$D^{[21]}=D^{(\frac{1}{2})} \tag{39.53}$$

为了得到每个不可约表示空间中的属于较低权的其他基矢，可逐次取$\mathscr{W}$中属于较低权的基矢经相应的$\hat{Y}_a^{[\lambda]}$作用来生成。请读者用此法作出所有不可约基，并与例2中给出的基矢矩形对照。

39.3 $SU(n)$的不可约张量表示

由G_n的张量表示的约化所得出的不可约表示$D^{[\lambda]}$，称为G_n的不可约张量表示。我们看到，G_n的不可约张量表示与S_m的不可约表示有密切关系，事实上属于$D^{[\lambda]}$的不可约张量（特别是不可约基）是由$\hat{Y}_1^{[\lambda]}\mathscr{W}$给出的，而$\hat{Y}_1^{[\lambda]}$由与$S_m$的表示$[\lambda]$相关的杨盘确定。

另一方面，在第五章中已经用李代数方法系统地讨论了李群的不可约表示，并将首权作为不可约表示的标记。因而存在如下的问题：以$[\lambda]$为标记的不可约张量表示$D^{[\lambda]}$是(等价于)首权为何值的表示？G_n的所有不可约张量表示是否能够穷尽其全部不可约表示？

下面以$G_n=SU(n)$的情形为例，来回答上述问题。

$SU(n)$是(n^2-1)维的实李群，其李代数的复扩充为$(n-1)$秩的单李代数$sl(n)\cong A_{n-1}$。所以，群$SU(n)$的表示空间、权、等等，都是与它的李代数A_{n-1}所共有的。

$D^{[\lambda]}$的表示空间$\hat{Y}_a^{[\lambda]}\mathscr{W}$的所有基矢，都可通过$\hat{Y}_a^{[\lambda]}$作用于$\mathscr{W}$的基矢来生成。假定对于$SU(n)$ (A_{n-1})的自然表示的基$\{\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n\}$已取为分属于$n$个权$m(1),m(2),\cdots,m(n)$的矢量，且基矢的下标是按权由大到小的顺序排列的，即有

$$m(1)>m(2)>\cdots>m(n) \tag{39.54}$$

张量表示的基矢 $\varphi_\lambda(1)\varphi_\mu(2)\cdots\varphi_\nu(m)$ 的权等于其中各个 φ 的权之和，所以 $\mathscr{W}$ 的每个基矢也是有确定权的矢量。若在 $\mathscr{W}$ 的某基矢中，φ_1 出现 f_1 次，φ_2 出现 f_2 次，…，则此基矢的权 M 可写为

$$M=f_1m(1)+f_2m(2)+\cdots+f_nm(n) \tag{39.55}$$

$$f_1+f_2+\cdots+f_n=m \tag{39.56}$$

因 $\hat{Y}_a^{[\lambda]}$ 与 $SU(n)$ 的表示(算子)可易，故 $\hat{Y}_a^{[\lambda]}$ 不改变矢量的权。所以 $\mathscr{W}$ 的任一基经 $\hat{Y}_a^{[\lambda]}$ 作用后，或变为零，或变为属于原来权的矢量。这样，空间 $\hat{Y}_a^{[\lambda]}\mathscr{W}$ 的所有基矢（如上生成的）都是属于确定权的矢量。下面将要证明，在空间 $\hat{Y}_a^{[\lambda]}\mathscr{W}$ 的所有这些基矢当中，以 $\hat{Y}_a^{[\lambda]}\Psi_a$ 的权为最高，Ψ_a 是 $\mathscr{W}$ 的形如(39.42)的基矢。为此只需证明，比 Ψ_a 具有更高的权的（$\mathscr{W}$ 的）基矢，都被 $\hat{Y}_a^{[\lambda]}$ 变为零。

在 Ψ_a 中 φ_1 出现 λ_1 次，φ_2 出现 λ_2 次，…，按(39.55)，Ψ_a 的权为

$$M_a=\lambda_1m(1)+\lambda_2m(2)+\cdots+\lambda_nm(n) \tag{39.57}$$

$$\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_n=m \tag{39.58}$$

其 λ_i 是分割 $[\lambda]$ 的分量。

在 26.4 节中，已写出 A_{n-1} $(n-1=l)$ 的嘉当子代数的基 $\{H_1,H_2,\cdots,H_n\}$，它们已经同时对角化了

$$H_1=\begin{pmatrix} \frac{n-1}{n} & & & 0 \\ & -\frac{1}{n} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & -\frac{1}{n} \end{pmatrix},$$

$$H_2=\begin{pmatrix} -\frac{1}{n} & & & & 0 \\ & \frac{n-1}{n} & & & \\ & & -\frac{1}{n} & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & -\frac{1}{n} \end{pmatrix}, \cdots, H_n=\begin{pmatrix} -\frac{1}{n} & & & & 0 \\ & -\frac{1}{n} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -\frac{1}{n} & \\ 0 & & & & \frac{n-1}{n} \end{pmatrix}。$$

这 n 个矩阵的对应的对角元，便是 $A_{n-1}(SU(n))$ 的自然表示的权的 n 个分量。从而有

$$\begin{cases} m(1)=\left(\frac{n-1}{n}, -\frac{1}{n}, -\frac{1}{n}, \cdots, -\frac{1}{n}\right) \\ m(2)=\left(-\frac{1}{n}, \frac{n-1}{n}, -\frac{1}{n}, \cdots, -\frac{1}{n}\right) \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ m(n)=\left(-\frac{1}{n}, -\frac{1}{n}, \cdots, -\frac{1}{n}, \frac{n-1}{n}\right) \end{cases} \tag{39.59}$$

这些权显然满足(39.54)，而前面所取的 $SU(n)$的自然表示的基 $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n$，正是分别属于这些权的本征矢。

将 (39.59) 代入 (39.55) 和 (39.57)，并用到 (39.56) 和 (39.58)，便可写出M和M_a的分量的明显公式

$$M_i=f_i-\frac{m}{n}, \quad i=1,2,\cdots,n \tag{39.60}$$

$$M_{ai}=\lambda_i-\frac{m}{n}, \quad i=1,2,\cdots,n \tag{39.61}$$

设Φ是$\mathscr{W}$的一个基矢，其权M高于Ψ_a的权M_a，即有

$$M > M_a \quad 或 \quad M - M_a > 0$$

按定义，上式要求$(M - M_a)$的第一个非零的分量为正数。假定$(M - M_a)$的第一个非零分量是第l个分量，则由(39.60)和(39.61)，必有

$$\begin{cases} f_1 = \lambda_1, \ f_2 = \lambda_2, \ \cdots, \ f_{l-1} = \lambda_{l-1} \\ f_l > \lambda_l \end{cases} \tag{39.62}$$

将Φ中的m个因子φ按其序号照盘(39.41)中的数码的方式排列，则可证明：当满足条件(39.62)时，在Φ的如上写法中，至少有一个列，其中的φ的下标不是互异的。为证此事，可用反证法。如果各列φ的下标都互异，我们对每列中φ的下标在列内进行重新安排，使其由上到下按递增顺序排列。这时，f_1个1必都处于第一行，由于$f_1 = \lambda_1$，第一行的λ_1个位置恰好被所有的1所占满；同理，f_2个2恰占满第二行的λ_2个位置；…；f_{l-1}个$(l-1)$恰占满第$(l-1)$行的λ_{l-1}个位置。由于同样的理由，f_l个下标l必都处于第l行，但这是不可能的，因为第l行只有$\lambda_l < f_l$个位置。从而导致矛盾。

先将$\hat{Y}_a^{[\lambda]}$的因子$\hat{P}$作用于Φ。由于Φ被S_m的任意置换作用后仍为$\mathscr{W}$的一个基矢，且其权仍为M，故可写

$$\hat{P}\Phi = \sum_k c_k \Phi_k$$

Φ_k是$\mathscr{W}$的权为M的基矢。将Φ_k中的m个φ按与Φ相同的方式排列，则如已经证明的，至少有一列φ的下标不是互异的。将$\hat{Y}_a^{[\lambda]}$的因子$\hat{Q}$作用于Φ_k，则$\hat{Q}$中与上面这个列相应的因子$(\sum_{q_j} \delta_{q_j} q_j)$将产生一个值为零的行列式(至少有两个行相同)。从而有

$$\hat{Q}\Phi_k = 0$$

所以

$$\hat{Y}^{[\lambda]}_{a}\Phi=\hat{Q}\hat{P}\Phi=0\ ,\qquad (M>M_a) \tag{39.63}$$

这就证明了，在表示空间$\hat{Y}^{[\lambda]}_{a}\mathscr{W}$中以矢量$\hat{Y}^{[\lambda]}_{a}\Psi_a$的权为最高，或表示$D^{[\lambda]}$的首权为$M_a$。

总之，我们有如下的结果：

以$[\lambda]$为标记的$SU(n)$的不可约张量表示，等价于首权为M_a的不可约表示，而M_a与$[\lambda]$的关系由(39.61)确定。

也可将此定理简记为

$$D^{[\lambda]}=D^{(M_a)}\qquad \left(M_a=\lambda-\frac{\sum_i\lambda_i}{n}\right) \tag{39.64}$$

在25.4节中已证明，$(M_1,M_2,\cdots,M_n)$是$A_{n-1}(SU(n))$的不可约表示的首权之充要条件为（见(25.58)和(25.59)）

$$\begin{cases}M_i-M_{i+1}=k_i\ (\text{非负整数})\ ,\ i=1,2,\cdots,n-1\\ \sum_{i=1}^{n}M_i=0\end{cases} \tag{39.65}$$

因而非负整数组$\{k_1,k_2,\cdots,k_{n-1}\}$与首权$M$一一对应，并可作为$A_{n-1}(SU(n))$的不可约表示的标记（单值的）。又由(39.61)有

$$\begin{cases}M_{ai}-M_{ai+1}=\lambda_i-\lambda_{i+1}\quad ,\ i=1,2,\cdots,n-1\\ \sum_{i=1}^{n}M_{ai}=0\end{cases} \tag{39.66}$$

因$(\lambda_i-\lambda_{i+1})$为非负整数，故如令

$$k_i=\lambda_i-\lambda_{i+1}\quad ,\ i=1,2,\cdots,n-1 \tag{39.67}$$

即可看出，$SU(n)$的不可约张量表示$D^{[\lambda]}$，穷尽了$SU(n)$的所有不可约表示。

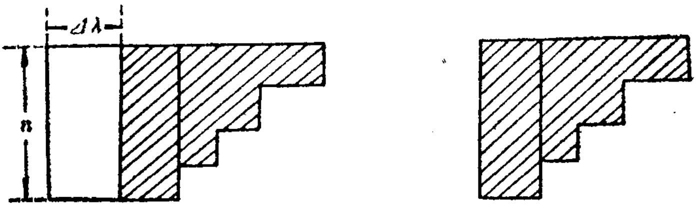
由(39.67)可见，$SU(n)$的不可约表示的标记$[\lambda]$不是单值的，$D^{[\lambda']}$与$D^{[\lambda]}$等价的充要条件为

$$\lambda_i'=\lambda_i+\Delta\lambda\quad ,\ i=1,2,\cdots,n \tag{39.68}$$

这是(39.64)的另一个重要推论。也可写为

$$D^{[\lambda']}=D^{[\lambda]}\langle -\rangle \lambda_i' - \lambda_i = \varDelta\lambda, \quad i=1,2,\cdots,n \quad (39.69)$$

满足(39.68)的两个台的关系又可如图39.1所示。



$[\lambda']$　　　　$[\lambda]$

图 39.1 $[\lambda]$与$[\lambda']$

两者的差别仅在于若干个具有 n 个格的列。

由(39.68)或上面的杨图，还可看出，对给定的$[\lambda]$，在所有满足(39.68)的$[\lambda']$当中，有一个格数最小的台($\varDelta\lambda=-\lambda_n$)

$$[\lambda_1-\lambda_n,\ \lambda_2-\lambda_n,\ \cdots,\ \lambda_{n-1}-\lambda_n,\ 0] \quad (39.70)$$

其杨图如图39.2。

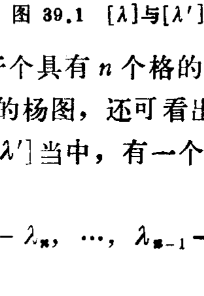


图 39.2 $[\lambda]$的一部分

这个台的特征，是其行数$r<n$，或其分割的第 n 个分量为零

$$\lambda_n=0 \quad (39.71)$$

如果限于这种台，则$[\lambda]$作为$SU(n)$的不可约表示的标记将是单值的。事实上，由(39.67)和(39.71)可解出

$$\begin{cases}\lambda_1 = k_1 + k_2 + \cdots + k_{n-1} \\ \lambda_2 = \quad k_2 + \cdots + k_{n-1} \\ \qquad \cdots\cdots \\ \lambda_{n-1} = \qquad k_{n-1}\end{cases} \tag{39.72}$$

这就给出了$[\lambda]=[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_{n-1}, 0]$和$\{k\}=\{k_1, k_2, \cdots, k_{n-1}\}$之间的一一对应。

至此，对$SU(n)$的不可约表示，已经用过三种标记的方法：首权M，非负整数组$\{k\}$，分割$[\lambda]$。对同一个表示，这三种参数的关系由(39.65)，(39.67)和(39.72)确定。$\{k\}$对应于不可约表示的角图（见25.5节）；由(39.67)又可看出，k_i又等于台$[\lambda]$中具有i个格的列的个数。前面在一般理论（第五章）中，关于$SU(n)$ (A_{n-1})的不可约表示的用首权表征的各项结果，现在都可以用$[\lambda]$来刻画。例如，关于不可约表示$D^{[\lambda]}$的维数公式(27.38)，用$[\lambda]$写出便是

$$n_\lambda = \prod_{i<j} \frac{(\lambda_i - \lambda_j) + (j-i)}{j-i} \tag{39.73}$$

由于$SU)n)$的不可约张量表示的构造，可借助于算子$\hat{Y}_a^{[\lambda]}$来具体地给出，所以用分割来标记$SU(n)$的不可约表示，在许多场合下都更便于进行分析。

考虑$SU(n)$的对偶表示。由25.6节的(25.75)，$SU(n)$的两个表示对偶的充要条件是，两个表示的无穷小算子（即$SU(n)\cong A_{n-1}$的表示）正好差一符号。因此，对偶表示的权的集合也差一符号。这样一来，一个表示的最低权乘以(-1)必为其对偶表示的首权。$SU(n)$的不可约表示$D^{[\lambda]}$可由不可约空间$\hat{Y}_a^{[\lambda]}\mathscr{W}$生成，它的最高权对应于$\mathscr{W}$中的特殊基矢$\Psi_a$。现在再取$\mathscr{W}$的另一特殊基矢$\Psi_b$，其形如（对应于盘(39.41)）

$\varphi_n(1)\varphi_n(5)\varphi_n(8)\varphi_n(11)\varphi_n(13)\varphi_n(14)\varphi_n(15)$

$\varphi_{n-1}(2)\varphi_{n-1}(6)\varphi_{n-1}(9)\varphi_{n-1}(12)$

$\varphi_{n-2}(3)\varphi_{n-2}(7)\varphi_{n-2}(10)$

$\varphi_{n-3}(4)$

与Ψ_a情形类似地，$\hat{Y}_a^{[\lambda]}\Psi_b$具有类似(39.46)的形式，且不为零($r\leqslant n$)。显然，$\hat{Y}_a^{[\lambda]}\Psi_b$的权为

$$M_{bi}=\lambda_{n+1-i}-\frac{m}{n}, \qquad i=1,2,\cdots,n \tag{39.74}$$

另一方面，用与前面同样的分析方法可以证明，$\hat{Y}_a^{[\lambda]}$把$\mathscr{W}$中权低于(39.74)的所有基矢变成零。从而得知，(39.74)是表示$D^{[\lambda]}$的最低权。所以，$D^{[\lambda]}$的对偶表示的首权为

$$-M_{bi}=\frac{m}{n}-\lambda_{n+1-i}, \qquad i=1,2,\cdots,n \tag{39.75}$$

如将此对偶表示记作$D^{[\lambda']}$，则有

$$\frac{m}{n}-\lambda_{n+1-i}=\lambda_i'-\frac{m}{n}, \qquad i=1,2,\cdots,n \tag{39.76}$$

或

$$\lambda_i'+\lambda_{n+1-i}=2\frac{m}{n}, \qquad i=1,2,\cdots,n \tag{39.77}$$

于是有如下结论：

$SU(n)$的表示$D^{[\lambda']}$与$D^{[\lambda]}$互为对偶的充要条件是

$$\lambda_1'+\lambda_n=\lambda_2'+\lambda_{n-1}=\cdots=\lambda_n'+\lambda_1 \tag{39.78}$$

满足(39.78)的两个台$[\lambda']$和$[\lambda]$正好并成一个n行的矩形（图39.3）。反之，若台$[\lambda']$和$[\lambda]$能如此并成一个n行的矩形，则有(39.78)成立。因而也可说：

$D^{[\lambda']}$与$D^{[\lambda]}$互偶的充要条件是，台$[\lambda']$和$[\lambda]$按图39.3并

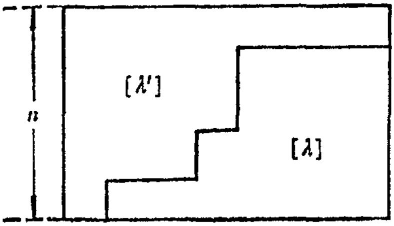


图 39.3 [λ]与[λ']的互补关系

成一个 n 行矩形。

注意，对于紧李群而言，因为任意有限维表示都等价于一个幺正表示，故其对偶表示的特征标等于其特征标的共轭复数。所以，对于紧李群和有限群来说，任意表示的对偶表示和复共轭表示，在等价的意义下是一回事。

因此，(39.78) 或图 39.3 也就是 $SU(n)$ 的表示 $D^{[\lambda']}$ 和 $D^{[\lambda]}$ 互为复共轭的条件（充要）。

由上述结论（定理），又可导出一个有用的推论：

$SU(n)$的满足(39.78)或图 39.3 的表示 $D^{[\lambda']}$与 $D^{[\lambda]}$，作为子群$SO(n)$的表示，是彼此等价的。

为证明这个推论，只需证明 $SU(n)$ 的任一不可约表示 $D^{[\lambda]}$，作为子群 $SO(n)$的表示时，其特征标是实数（等价于一个实表示）。

我们回到张量表示空间的约化公式(39.49)。显然，在使用分割记法时，$SU(n)$的自然表示应记为 $D^{[1]}$，而由(39.49)所表达的约化公式可写为

$$\underbrace{D^{[1]}\otimes D^{[1]}\otimes\cdots\otimes D^{[1]}}_{m\text{个}}=\sum_{\substack{[\lambda]\\(\Sigma\lambda_i=m,\ r<n)}}\oplus n[\lambda]D^{[\lambda]} \tag{39.79}$$

由算子$\hat{Y}_i^{[\lambda]}$的定义知，它将$\mathscr{W}$的每个基矢（见(39.38)）变为这些基矢的整系数组合。所有这些组合，张成不可约子空间$\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W}$，从而可取一部分这样的组合作为$\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W}$的基。所以，由$\mathscr{W}$的基(39.38)到不可约基的变换矩阵$S$，可以取为整数矩阵。这个$S$，也就是实现约化(39.79)的变换矩阵。

如果自然表示$D^{[1]}$的矩阵就取为$SU(n)$的矩阵，则$D^{[1]}$作为$SO(n)$的表示的矩阵为实的。这时(39.79)左边的直积表示的矩阵，对子群$SO(n)$也将是实的，它经S作相似变换后仍是实的。因而，这时出现在(39.79)右边的$D^{[\lambda]}$，作为子群$SO(n)$的表示矩阵也是实的。因为$SU(n)$的每个不可约表示$D^{[\lambda]}$都可通过(39.79)生成（在等价意义下），这就证明了，$SU(n)$的任一不可约表作为子群$SO(n)$的表示时，都具有实特征标。

39.4 $SU(n)$的C——G级数

上节的(39.79)给出了$SU(n)$的自然表示的m次直积的约化公式。我们看到，用分割记号来表述这一结果，是十分简洁的：每个满足条件$\sum\lambda_i=m$和$r\leqslant n$的$D^{[\lambda]}$出现的次数等于$[\lambda]$的维数；其他$D^{[\lambda]}$不出现。利用这个公式可以很方便地将$SU(n)$的自然表示的直积约化。

例 1 m个电子自旋函数空间的约化

单电子自旋函数空间按$SU(2)$的自然表示$D^{[1]}=D^{(\frac{1}{2})}$变换，$m$个电子自旋函数空间的基为$\{\varphi_\lambda(1)\varphi_\mu(2)\cdots\varphi_\nu(m):\lambda,\mu,\cdots,\nu=1,2\}$，它按$D^{[1]}$的$m$次直积

$$D^{[1]}\otimes D^{[1]}\otimes\cdots\otimes D^{[1]}=D^{(\frac{1}{2})}\otimes D^{(\frac{1}{2})}\otimes\cdots\otimes D^{(\frac{1}{2})}$$

变换。这个表示的约化也可用以权为标记的$SU(2)$的C——G级数作出，现在用公式(39.79)。

出现在(39.79)中的$D^{[\lambda]}$需满足($n=2$)

$$\lambda_1+\lambda_2=m \qquad \lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant 0$$

从而有

$$[\lambda]=[m,0],\ [m-1,1],\cdots,\begin{cases}\left[\dfrac{m}{2},\dfrac{m}{2}\right], & m=\text{偶数}\\ \left[\dfrac{m+1}{2},\dfrac{m-1}{2}\right], & m=\text{奇数}\end{cases}$$

$$=[m-l,\ l],\quad l=0,1,2,\cdots,\begin{cases}\dfrac{m}{2}\\ \dfrac{m-1}{2}\end{cases}\tag{39.80}$$

由维数公式(36.28)

$$n[m-l,l]=\frac{m!}{(m+1-l)!\,l!}(m+1-2l)\tag{39.81}$$

代入(39.79)，得

$$\underbrace{D^{[1]}\otimes D^{[1]}\otimes\cdots\otimes D^{[1]}}_{m\ \text{个}}=\sum_{l=0}^{\frac{m}{2},\ \frac{m-1}{2}}\frac{m!\,(m+1-2l)}{(m+1-l)!\,l!}D^{[m-l,l]}\tag{39.82}$$

对 $SU(2)$，李代数的嘉当子代数由 $\{H_1, H_2\}$张成，按上节中写出公式（令$n=2$）有

$$H_1=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & 0\\ 0 & -\frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad H_2=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & 0\\ 0 & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\quad (H_1+H_2=0)$$

独立基矢可取为（注意这李代数的秩为1）

$$H_1'=\frac{1}{2}(H_1-H_2)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=H_1$$

这时（见25.1节）与 H'相应的算子 $\hat{H}'=\hat{S}_z$（取 $\hbar=1$），因

而权即是量子数 M_S（不可约表示的首权为量子 数 S），且有 $M_S=\frac{1}{2}(M_1-M_2)$。从而得

$$S=\frac{1}{2}(\lambda_1-\lambda_2)=\frac{m}{2}-l \tag{39.83}$$

即有

$$D^{(S)}=D^{\left[\frac{m}{2}+S,\ \frac{m}{2}-S\right]}=D^{[2S,0]} \tag{39.84}$$

例如，(39.52)和(39.53)都是上式的特例。

(39.84)表明，多电子体系的自旋波函数的置换对称性，完全被其总自旋量子数确定，反之亦然。总自旋量子数有确定值 S 的态，其置换对称性如图39.4所示。

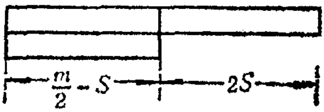


图 39.4　多电子自旋函数的置换对称性

其中 m 为电子数。例如，双电子的 $S=0$ 的态一定是反对称的 ()，$S=1$ 的三个态一定都是对称的 ()。再如，在 39.2节的例 2 当中，三电子的 $S=\frac{3}{2}$ 的四个态必须都是对称的 ()，而 $S=\frac{1}{2}$ 的二重态必有置换对称性 ，等等。

用自旋量子数来标记不可约表示时，约化公式(39.82)可写为

$$\underbrace{D^{(\frac{1}{2})}\otimes D^{(\frac{1}{2})}\otimes\cdots\otimes D^{(\frac{1}{2})}}_{m\text{个}}=\sum_{S=0,\frac{1}{2}}^{\frac{m}{2}}\frac{m!\,(2S+1)}{\left(\frac{m}{2}+1+S\right)!\left(\frac{m}{2}-S\right)!}D^{(S)}$$

(39.85)

求和中，当m为偶数时，S的起点为0；当m为奇数时，S的起点为$\frac{1}{2}$。

例 2 $SU(3)$的表示$\mathbf{3}\otimes\mathbf{3}\otimes\mathbf{3}$的约化

$\mathbf{3}=D^{[1]}$，是$SU(3)$的自然表示（见28.1节）。由(39.79)有

$$D^{[1]}\otimes D^{[1]}\otimes D^{[1]}=D^{[3]}\oplus 2D^{[21]}\oplus D^{[1^3]}$$

(39.86)

其中$D^{[1^3]}=D^{[111]}=D^{[000]}$是单位表示（首权为零矢量）。对$SU(3)$的表示回到维数记法，得

$$\mathbf{3}\otimes\mathbf{3}\otimes\mathbf{3}=\mathbf{10}\oplus\mathbf{8}\oplus\mathbf{8}\oplus\mathbf{1} \qquad (39.87)$$

公式(39.79)只解决了$SU(n)$的自然表示的直积的约化问题，现在进一步考虑$SU(n)$任意不可约表示直积的约化问题。

设$\{\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n\}$为$SU(n)$的自然表示的基，则$SU(n)$的一个$m_1$次张量表示空间$\mathscr{W}_1$可由基$\{\varphi_\lambda(1)\varphi_\mu(2)\cdots\varphi_\nu(m_1):\lambda,\mu,\cdots,\nu=1,2,\cdots,n\}$张成，$SU(n)$的一个$m_2$次的张量表示空间$\mathscr{W}_2$可由基$\{\varphi_\lambda(m_1+1)\varphi_\mu(m_1+2)\cdots\varphi_\nu(m_1+m_2):\lambda,\mu,\cdots,\nu=1,2,\cdots,n\}$张成。这时，由基$\{\varphi_\lambda(1)\varphi_\mu(2)\cdots\varphi_\nu(m_1+m_2):\lambda,\mu,\cdots,\nu=1,2,\cdots,n\}$张成的空间$\mathscr{W}_1\otimes\mathscr{W}_2=\mathscr{W}$，显然是$SU(n)$的一个$(m_1+m_2)$次的张量表示空间。按39.2节的结果，$\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W}_1$是$SU(n)$的不可约表示$D^{[\lambda]}$的表示空间，$\hat{Y}_{i'}^{[\lambda']}\mathscr{W}_2$是

$SU(n)$的不可约表示$D^{[\lambda']}$的表示空间（$[\lambda]$和$[\lambda']$的行数都不大于n），其中$[\lambda]$和$[\lambda']$分别为群$S_{m_1}=S_{m_1}(1,2,\cdots,m_1)$和$S'_{m_2}=S_{m_2}(m_1+1，m_1+2，\cdots，m_1+m_2)$的不可约表示，算子$\hat{Y}_i^{[\lambda]}$和$\hat{Y}_{i'}^{[\lambda']}$分别作用于数码$\{1,2,\cdots,m_1\}$和数码$\{m_1+1，m_1+2，\cdots，m_1+m_2\}$。

显然$(\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W}_1)\otimes(\hat{Y}_{i'}^{[\lambda']}\mathscr{W}_2)$是$D^{[\lambda]}\otimes D^{[\lambda']}$的表示空间，现设法将此空间按$SU(n)$的不可约表示约化。

注意到$\hat{Y}_{i'}^{[\lambda']}$对$\mathscr{W}$中的矢量无作用，则有

$$(\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W}_1)\otimes(\hat{Y}_{i'}^{[\lambda']}\mathscr{W}_2)=\hat{Y}_i^{[\lambda]}\hat{Y}_{i'}^{[\lambda']}(\mathscr{W}_1\otimes\mathscr{W}_2)$$
$$=\hat{Y}_i^{[\lambda]}\hat{Y}_{i'}^{[\lambda']}\mathscr{W} \tag{39.88}$$

以$\mathscr{R}$表群$S_{m_1+m_2}=S_{m_1+m_2}(1,2,\cdots,m_1+m_2)$的代数，因$\mathscr{W}$在$S_{m_1+m_2}$下不变，故有

$$\hat{\mathscr{R}}\mathscr{W}=\mathscr{W} \tag{39.89}$$

从而

$$(\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W}_1)\otimes(\hat{Y}_{i'}^{[\lambda']}\mathscr{W}_2)=(\hat{Y}_i^{[\lambda]}\hat{Y}_{i'}^{[\lambda']}\hat{\mathscr{R}})\mathscr{W} \tag{39.90}$$

按外积的定义（见38.1节），若$\psi_i^{[\lambda]}$是S_{m_1}的一个不可约基矢，$\psi_{i'}^{[\lambda']}$是S'_{m_2}的一个不可约基矢，则矢量集合$\{\hat{s}\psi_i^{[\lambda]}\psi_{i'}^{[\lambda']}：s\in S_{m_1+m_2}\}$张成外积表示$[\lambda]\odot[\lambda']$的一个表示空间。现将$\mathscr{R}$看作是群$S_{m_1+m_2}$的右正则表示的表示空间，$S_{m_1+m_2}$的群元对$\mathscr{R}$中矢量的作用是右乘

$$\hat{s}v=vs\quad,\quad s\in S_{m_1+m_2}\quad,\quad v\in\mathscr{R}$$

再注意$Y_i^{[\lambda]}$作为$\mathscr{R}$中的矢量是子群S_{m_1}的一个不可约基矢，$Y_{i'}^{[\lambda']}$是子群S'_{m_2}的一个不可约基矢，便可断言：由矢量集$\{Y_i^{[\lambda]}Y_{i'}^{[\lambda']}s：s\in S_{m_1+m_2}\}$所张成的空间

$$Y_i^{[\lambda]}Y_{i'}^{[\lambda']}\mathscr{R}=\mathscr{R}' \tag{39.91}$$

是外积表示$[\lambda]\odot[\lambda']$的一个表示空间。

可用杨算子$\bar{Y}_l^{[\Lambda]}$（关于群$S_{m_1+m_2}$的）将外积表示空间$\mathscr{R}'$进行约化。显然，$\hat{Y}_l^{[\Lambda]}\mathscr{R}'$是$S_{m_1+m_2}$的一个不变（右乘）子空间，且有$\bar{Y}_l^{[\Lambda]}\mathscr{R}'\subset\bar{Y}_l^{[\Lambda]}\mathscr{R}$。但$\bar{Y}_l^{[\Lambda]}\mathscr{R}$是$S_{m_1+m_2}$的不可约子空间，它不再有不变的真子空间。所以有

$$\bar{Y}_l^{[\Lambda]}\mathscr{R}'=\bar{Y}_l^{[\Lambda]}\mathscr{R}\quad \text{或}\quad \{0\} \tag{39.92}$$

从而可得$\mathscr{R}'$的分解式

$$\mathscr{R}'=\sum_{[\Lambda],l}{}'\oplus\bar{Y}_l^{[\Lambda]}\mathscr{R} \tag{39.93}$$

其中的$\sum'$只对满足

$$\bar{Y}_l^{[\Lambda]}\mathscr{R}'\neq 0 \tag{39.94}$$

的所有$[\Lambda]$和l求和。

将(39.93)代入(39.91)再代回(39.90)，并注意(39.89)，最后得

$$(\hat{Y}_i^{[\lambda]}\mathscr{W}_1)\otimes(\hat{Y}_{i'}^{[\lambda']}\mathscr{W}_2)=\sum_{[\Lambda],l}{}'\oplus\hat{Y}_l^{[\Lambda]}\mathscr{W} \tag{39.95}$$

其中的求和条件也可更直接地写为

$$\bar{Y}_l^{[\Lambda]}\bar{Y}_i^{[\lambda]}\bar{Y}_{i'}^{[\lambda']}\neq 0 \tag{39.96}$$

上式是将(39.91)代入(39.94)，并注意$v\mathscr{R}=\{0\}\Longleftrightarrow v=0$，得出的。

以上的主要结果是(39.93)和(39.95)，前者是置换群的外积$[\lambda]\odot[\lambda']$的约化公式，后者是$SU(n)$群的直积表示$D^{[\lambda]}\otimes D^{[\lambda']}$的约化公式，重要的是给出了两者之间的联系。若在$\sum\limits_{[\Lambda],l}{}'$中，对给定的$[\Lambda]$不同$l$出现的次数(重复度）为$a_{\Lambda,\lambda,\lambda'}$，则与(39.39)相应的约化公式也可写为

$$[\lambda]\odot[\lambda']=\sum_{\Lambda}a_{\Lambda,\lambda,\lambda'}[\Lambda] \tag{(38.16)}$$

为了写出与(39.95)相应的约化公式，还要注意到在$\hat{Y}_l^{[\Lambda]}\mathscr{W}$当

中，有些可能为{0}。在39.2节中已证明

$$\hat{Y}_l^{[\Lambda]}\mathscr{W}=0 \Longleftrightarrow [\Lambda]\text{的行数} r>n \qquad (39.97)$$

因而，将(39.95)中等于零的项去掉后，有

$$D^{[\lambda]}\otimes D^{[\lambda']}=\sum_{\substack{\Lambda\\(r\leq n)}} a_{\Lambda,\lambda,\lambda'}D^{[\Lambda]} \qquad (39.98)$$

这就是$SU(n)$的C——G级数。在27.5节中，曾对半单李群一般地导出了计算C——G级数的方法，但那个普遍的方法在实际运用时很不方便。现在利用线性群与置换群的关系，导出了$SU(n)$的C——G级数与置换群的外积约化公式的简单关系。对比(38.16)和(39.98)可见，为了写出$SU(n)$的C——G级数，可利用约化外积的图形规则（见38.3节），并在作图过程中略去所有行数超过n的图。

例 3 $SU(3)$的表示$\mathbf{8}\otimes\mathbf{8}$的约化

$\mathbf{8}=D^{[21]}$，在38.3节的例2中已经作出$[21]\odot[21]$的约化结果，去掉行数>3的$[31^3]$和$[2^21^2]$之后，可写

$$\begin{aligned}D^{[21]}\otimes D^{[21]}&=D^{[42]}\oplus D^{[41^2]}\oplus D^{[3^2]}\oplus D^{[321]}\oplus D^{[321]}\oplus D^{[2^3]}\\&=D^{[42]}\oplus D^{[3]}\oplus D^{[3^2]}\oplus D^{[21]}\oplus D^{[21]}\oplus D^{[0]}\end{aligned}$$

此即

$$\mathbf{8}\otimes\mathbf{8}=\mathbf{27}\oplus\mathbf{10}\oplus\overline{\mathbf{10}}\oplus\mathbf{8}\oplus\mathbf{8}\oplus\mathbf{1} \qquad ((28.8))$$

与27.5节中用一般方法算出的结果(27.50)或(27.51)相同。请读者对两种方法的繁简进行比较。

由(39.98)可见，$SU(n)$的C——G级数并不会因n的增大而明显增加其复杂性。当n达到在外积约化中出现的$[\Lambda]$的行数的最大值后，(39.98)将不再因n的增大而变化，这时$D^{[\lambda]}\otimes D^{[\lambda']}$的约化系数与$[\lambda]\odot[\lambda']$的约化系数完全相同。

例 4 $SU(n)$ $(n\geqslant4)$的表示$D^{[21]}\otimes D^{[21]}$的约化

因$[21]\odot[21]$中出现的$[\Lambda]$的最大行数是4，所以当$n\geqslant4$

时，所有出现在$[21]\odot[21]$中的$[\Lambda]$都满足$r\leqslant n$。因而此时只须在$SU(3)$的相应约化式中，将曾经从$[21]\odot[21]$中去掉的两个$r=4$的图$[31^3]$和$[2^21^2]$加进来就行了。注意$D^{[31^3]}=D^{[2]}$和$D^{[2^21^2]}=D^{[1^2]}$，便得

$$D^{[21]}\otimes D^{[21]}=D^{[42]}\oplus D^{[41^2]}\oplus D^{[3^2]}\oplus 2D^{[321]}\oplus D^{[2]}\oplus D^{[2^3]}\oplus D^{[1^2]}$$

注意：对$SU(3)$存在的等价关系$D^{[41^2]}=D^{[3]}$，$D^{[321]}=D^{[21]}$和$D^{[2^3]}=D^{[0]}$，对$SU(n)$ $(n\geqslant4)$已不复存在。

§ 40　对多电子体系的应用

40.1　多电子体系状态的分类

单电子的自旋波函数的空间是二维的，设取一组基$\{\omega_{m_s}\}=\{\omega_{\frac{1}{2}},\ \omega_{-\frac{1}{2}}\}$；其空间波函数的空间一般是无穷维的，但在某一特定问题中也可取为有限维的，也取其一组基$\{\varphi_\lambda:\lambda=1,2,\cdots\}$。这时$f$个电子的体系的波函数$\Psi$显然总可写为下列基函数的线性组合

$$\left\{\varphi_\lambda(1)\varphi_\mu(2)\cdots\varphi_\nu(f)\omega_{m_{s1}}(1)\omega_{m_{s2}}(2)\cdots\omega_{m_{sf}}(f)\right.$$
$$\left.:\lambda,\mu,\cdots,\nu=1,2,\cdots;\ m_{si}=\pm\frac{1}{2}\right\}\qquad(40.1)$$

因全同性原理的要求，组合$\Psi=\Psi(1,2,\cdots,f)$对f个电子的标号必须是反称的。一切可能的反称组合$\{\Psi\}$便张成了f个电子体系的状态空间。

所谓电子体系状态的分类，就是要在状态空间$\{\Psi\}$中选取基矢，基的不同取法就给出不同的分类。我们已在第五章中阐明，从物理的角度看，最合理的是将状态按体系的对称群的不

可约表示来分类，亦即将 $\{\Psi\}$ 的基取为体系对称群的不可约基。特别是这样的态或者本身就是定态，或者只在较小的范围内（只对附加量子数）进行组合就可构成定态。本节主要是针对构造定态波函数问题来讨论分类的。我们面临的问题是如何构造(40.1)的具有确定变换性质的总反称组合，并使其尽可能地接近定态。

首先，对单电子的空间波函数应按力场的对称性G进行分类，并假定已取为单电子近似下的定态函数。即 (40.1)中的φ_λ已取为G的不可约基并为单电子定态函数。在原子的情况下，$G=SO(3)$；在分子的情况下，G 为该分子的点群；等等。显然，在略去电子之间的作用和与自旋有关的作用的情况下，(40.1)中的每个基矢都是 $\hat{H}_0$ 的本征函数，反称化后便成为零级近似的定态波函数。这时的能级仅取决于电子的组态。因此，如果对 (40.1) 中属于同一组态的函数进行任意总反称组合，得到的仍为属于原来能级（组态）的零级波函数。我们只是希望，这样组合出来的新的零级波函数，能够尽量使含有相互作用（或自旋）的$\hat{H}'$对角化。

按上述要求，分类方法不是唯一的，与所取的近似有关。例如，对于电子间的不同的耦合方案，将有不同的分类基。

40.2 原子 LS 耦合的分类基

为简单起见，我们只考虑 f 个电子处于同一壳层的情况（相当于略去满壳层），这时电子的组态为 $(nl)^f$，其中 n 和 l 分别单电子态的主量子数和角量子数。由于 l 已经给定，这时单电子的空间波函数张成的空间是 $(2l+1)$ 维的，基函数为 $\{R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)：m=0,\pm1,\cdots,\pm l\}$。因 n 和 l 是确定的，可简记

$$\varphi_m=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{40.2}$$

而(40.1)这时应为

$$\left\{\varphi_{m_1}(1)\varphi_{m_2}(2)\cdots\omega_{m_f}(f)\omega_{m_{s1}}(1)\omega_{m_{s2}}(2)\cdots\omega_{m_{sf}}(f)\right.$$

$$\left.: m_i=0,\pm1,\cdots,\pm l;\ m_{si}=\pm\frac{1}{2}\right\} \quad (40.3)$$

这是组态$(nl)^f$的非反称本征函数的完备系，张成一个$(2(2l+1))^f$维空间。

从群论的观点看，(40.3)是按$\hat{H}_0$的对称群G_0来分类的。因为$\hat{H}_0$与每个电子的空间旋转算子及每个电子的自旋旋转算子都可易，所以每个电子的空间坐标的旋转群$SO(3)_{ri}$和自旋坐标的旋转群$SO(3)_{si}$，都是$\hat{H}_0$的对称群，而G_0为这些群的直积

$$\begin{aligned}G_0=&SO(3)_{r1}\times SO(3)_{r2}\times\cdots\times SO(3)_{rf}\\&\times SO(3)_{s1}\times\cdots\times SO(3)_{sf}\end{aligned} \quad (40.4)$$

(40.3)正是G_0的不可约基，属于G_0的不可约表示

$$\underbrace{D^{(l)}\otimes D^{(l)}\otimes\cdots\otimes D^{(l)}}_{f\text{个}}\otimes\underbrace{D^{(\frac{1}{2})}\otimes\cdots\otimes D^{(\frac{1}{2})}}_{f\text{个}} \quad (40.5)$$

它对于G_0的不可约性，是由于各因子群的不可约表示的直积是直积群的不可约表示。

在LS耦合方案中，优先考虑的微扰项是电子间的静电作用$\hat{H}'_1$。$\hat{H}'_1$是电子距离的函数，因而单个电子空间函数的转动算子与$\hat{H}'_1$不可易，即$SO(3)_{ri}$不是$\hat{H}'_1$的对称群。从而G_0也不是$\hat{H}'_1$的对称群。但$\hat{H}'_1$在全部电子的空间变量同时转动下是不变的（电子间距不变），因而$SO(3)_r$是$\hat{H}'_1$的对称群。$\hat{H}'_1$与自旋无关，故$SO(3)_{si}$仍是$\hat{H}'_1$的对称群。总之，群G_1是$\hat{H}'_1$的对称群

$$G_1 = SO(3)_r \times SO(3)_{s1} \times \cdots \times SO(3)_{sf} \qquad (40.6)$$

$SO(3)_r$中的操作是同时转动f个电子的空间变量，属于分别转动各个电子的空间变量操作的特殊情况（f个转动恰好相同）。因而$SO(3)_r$是直积群$\prod_{i=1}^{f} SO(3)_{ri}$的子群，$G_1$是$G_0$的子群。总之，微扰项$\hat{H}_1'$使对称性$G_0$缩小为$G_1$。为了使$\hat{H}_1'$尽可能对角化，现在需将(40.3)重新按$G_1$分类，这也就是将$G_0$的不可约表示(40.5)按子群$G_1$进行约化。而这一约化与自旋函数无关，只须将$\prod_{i=1}^{f} SO(3)_{ri}$的不可约基

$$\{\varphi_{m_1}(1)\varphi_{m_2}(2)\cdots\varphi_{m_f}(f) : m_i = 0, \pm 1, \cdots, \pm l\} \qquad (40.7)$$

重新组合成子群$SO(3)_r$的不可约基。即将$\prod_{i=1}^{f} SO(3)_{ri}$的不可约表示

$$\underbrace{D^{(l)} \otimes D^{(l)} \otimes \cdots \otimes D^{(l)}}_{f\text{个}} \qquad (40.8)$$

作为子群$SO(3)_r$的表示进行约化。

(40.8)作为$SO(3)_r$的表示，乃是它的不可约表示$D^{(l)}$的f次直积，可用熟知的方法进行约化。但为了引入更多的对称量子数，我们先不直接这样，而分成两步来考虑。

首先，由§21知，$D^{(l)}$的矩阵都是幺正的，而且还是单模的。单模性可如下看出：任一转动矩阵都可经一相似变换化成关于z轴转动的矩阵

$$\begin{pmatrix} e^{-il\alpha} & & & 0 \\ & e^{-i(l-1)\alpha} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & e^{il\alpha} \end{pmatrix}$$

而相似变换前后矩阵的行列式相等，都等于

$$\prod_{m=-l}^{l} e^{im\alpha}=e^{i\alpha\sum\limits_{m=-l}^{l} m}=1$$

所以矩阵群 $D^{(l)}$是$SU(2l+1)$的子群。如将$D^{(l)}$扩充为$SU(2l+1)$，则$D^{(l)}$的基$\{\varphi_m: m=0, \pm1, \cdots, \pm l\}$便成为$SU(2l+1)$的自然表示的$D^{[1]}$的基。因而可将(40.8)看作是$SU(2l+1)$的张量表示

$$\underbrace{D^{[1]}\otimes D^{[1]}\otimes\cdots\otimes D^{[1]}}_{f\text{个}} \tag{40.9}$$

的基。$SU(2l+1)$的表示$D^{[1]}$作为子群$SO(3)$的表示时，便是$D^{(l)}$，即有

$$D^{[1]}|_{SO(3)}=D^{(l)} \tag{40.10}$$

同理，(40.9)当作是$SU(2l+1)$的子群$SO(3)$的表示时，便退化为(40.8)。

基于以上的分析，将(40.7)按$SO(3)$，约化的问题，现可分两步进行：先将(40.7)按$SU(2l+1)$约化，即将(40.9)约化；再将得到的$SU(2l+1)$的各个不可约表示$D^{[\lambda]}$按子群$SO(3)$进行约化。第一步约化，已在上节中讨论过了，得出的$SU(2l+1)$不可约基，同时也是S_f（f个电子的置换群）的不可约基，可写成形如(39.3)那样的矩形。假定对S_f的表示$[\lambda]$的基矢已经标准化，因而可用Y符号(r)来标记(矩形的列标)；对$SU(2l+1)$的表示$D^{[\lambda]}$的不同基矢，可用η标记（矩形的行标）。于是第一步约化的不可约基可用三个参数，即$[\lambda]$、η、(r)来标记。第二步是约化每个$D^{[\lambda]}|_{SO(3)}$，实际上是将$D^{[\lambda]}$的不可约基对η进行组合，以得出相对于子群$SO(3)$的不可约基，亦即实现

$$D^{[\lambda]}|_{SO(3)}=\sum_L a_{L,\lambda}D^{(L)} \tag{40.11}$$

这样得出的$SO(3)$的不可约基，应由$[\lambda]$，α，L，M_L，(r)

来标记，原来的η（求和指标）已由三个参数α、L、M_L所取代，α是用来区分重复出现的$D^{(L)}$基矢的指标。这样就将(40.7)重新组合为$SO(3)_r$的不可约基：

$$\{\Phi(l^f[\lambda]\alpha LM_L(r))\} \tag{40.12}$$

其中l^f是组态符号，是确定的；$[\lambda]$取遍行数$\leqslant(2l+1)$的所有f次台；$\alpha=1,2,\cdots,a_{L,\lambda}$；$L$是总轨道角动量量子数，取值按(40.11)受限于$[\lambda]$；$M_L$是总轨道角动量投影量子数，$M_L=-L,\ -L+1,\ \cdots,L$。因基矢变换不改变空间的维数，(40.12)中基矢的总数与(40.7)中的基矢数相同，都等于$(2l+1)^f$。在(40.12)的写法里，略去了Φ中的电子序号指标$(1,2,\cdots,f)$。

新基(40.12)明显优越于旧基(40.7)：二者虽然都是$\hat{H}_0$的本征函数，但(40.12)比(40.7)更接近于$\hat{H}_1^i$的本征函数。这是因为，(40.12)是群$SO(3)_r$的不可约基，相应的量子数为L和M_L，(40.12)同时也是群S_f的不可约基，相应的量子数为$[\lambda]$和(r)，而$SO(3)_r$和S_f都是$\hat{H}_1^i$的对称群，故在基(40.12)下，$\hat{H}_1^i$关于量子数L、M_L、$[\lambda]$、(r)都是对角化的，且对角元只依赖L和$[\lambda]$而与M_L和(r)无关。我们在此指出，基(40.12)的本质特征在于，它是$\hat{H}_1^i$的对称群$SO(3)_r\times S_f$的不可约基。所以，实际实现由(40.7)到(40.12)变换的途径并不是唯一的。例如也可先将(40.7)按$SO(3)_r$分类，再将有相同量子数(L, M_L)的基矢组合按S_f分类，同样可得出$SO(3)_r\times S_f$的不可约基。这与前面讲到的约化步骤恰好相反。

再来考虑自旋函数的分类问题。单就使基矢尽量接近$\hat{H}_1^i$的本征函数这一要求来说，自旋函数如何分类本来是无所谓的，因$\hat{H}_1^i$与自旋无关。但最后要求构成总反称的波函数，而能与空间函数$\Phi(l^f[\lambda]\alpha LM_L(r))$相乘并组合成总反称函数的自旋函数，必须是$S_f$的$[\tilde{\lambda}]$基（见36.6节），这就要求将自旋函数按$S_f$来分类。

自旋函数的空间是f个单电子自旋函数空间的直积。由于$SO(3)_S \cong SU(2)$，而矩阵群$D^{(\frac{1}{2})}$与$SU(2)$是一回事，所以对空间函数的两步约化结果，对于自旋函数来说是一步实现的。也就是说，将自旋函数按S_f来分类和按$SO(3)_s$来分类，两者总是同时实现的。并且，具体的约化公式已在39.4节的例1中作出。所以，自旋函数的$SO(3)_S \times S_f$不可约基可写为

$$\{\Omega([\lambda']SM_S(r'))\} \tag{40.13}$$

其中，$[\lambda']$取遍行数$\leqslant 2$的所有f次台；总自旋量子数S与$[\lambda']$不是相互独立的

$$S=\frac{1}{2}(\lambda_1'-\lambda_2') \quad 或 \quad \begin{cases} \lambda_1'=\dfrac{f}{2}+S \\ \\ \lambda_2'=\dfrac{f}{2}-S \end{cases} \tag{40.14}$$

总自旋投影量子数$M_S=-S,\ -S+1,\cdots,S$；(r')取$n[\lambda']$个不同值。(40.13)中基矢的总数等于自旋函数空间的维数2^f。

最后要用(40.12)和(40.13)的乘积构成总反称波函数。这时，参与同一组合的$[\lambda]$和$[\lambda']$必须是互偶的，因而$[\lambda]$的列数$\lambda_1 \leqslant 2$，$[\lambda']$的列数$\lambda_1' \leqslant (2l+1)$。可见在构成总反称函数时，只能用到(40.12)和(40.13)中的一部分基矢。这是自然的，因为总反称函数的集合，只是(40.3)所张成的$(2l+1)^f \cdot 2^f$维空间的一个$\dfrac{[2(2l+1)]!}{f!\,[2(2l+1)-f]!}$维的子空间。这个子空间的关于$SO(3)_r \times SO(3)_S$的一组不可约基，可由$\Phi$和$\Omega$通过(37.49)作出：

$$\Psi(l^f[\lambda]\alpha LM_L SM_S)$$
$$=\frac{1}{\sqrt{n[\lambda]}}\sum_{(r)}(-1)^{\delta_r}\Phi(l^f[\lambda]\alpha LM_L(r))\,\Omega([\tilde{\lambda}]SM_S(\tilde{r})) \tag{40.15}$$

其中和号前的因子是归一化因子。因表示 $D^{(L)}$、$D^{(S)}$和$[\lambda]$的标准矩阵都是幺正的，$D^{[\lambda]}$的矩阵也可取为幺正的，所以Φ和Ω对各自的全部量子数都是正交的。假定Φ和Ω均已归一化，则由（40.15）给出的Ψ将构成由组态l^f所确定的电子体系的总反称函数空间的一组正交归一基。Ψ中的量子数$[\lambda]$与S不是相互独立的，事实上有（图40.1）

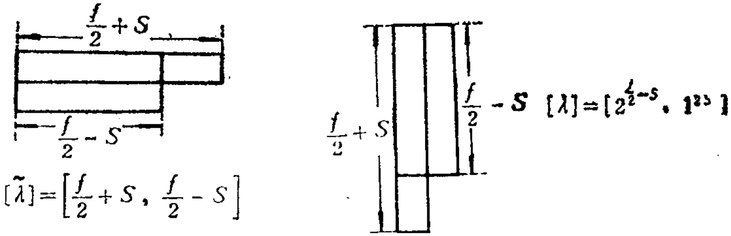


图 40.1 $[\lambda]$与S的关系

所以$[\lambda]$可从Ψ中删去。而$[\lambda]$的行数$\left(\frac{f}{2}+S\right)\leqslant(2l+1)$的条件又导致了对$\Psi$中的量子数$S$的限制

$$S\leqslant 2l+1-\frac{f}{2} \tag{40.16}$$

最后，量子数L的取值范围通过$[\lambda]$（由于(40.11)）受限于S。

从物理的角度讲，(40.15)给出的Ψ构成了$\hat{H}_0$的属于能量$E_0(l^f)$的反称波函数的正交归一的完备系。这个函数系的优越性在于，它不仅是$\hat{H}_0$的本征态，而且也很接近于$(\hat{H}_0+\hat{H}')$的本征态，因为$\hat{H}'$在这个函数系下的矩阵关于量子数$S([\lambda])$、M_S、L、M_L是对角化的。当$a_{L,\lambda}=1$时，Ψ就是$(\hat{H}_0+\hat{H}')$的本征态，其能量$E(l^f,L,S)$关于M_L和M_S显然是简并的，简

并度为$(2L+1)(2S+1)$。当$a_{L,\lambda}>1$时，由(40.15)组合成$(\hat{H}_0+\hat{H}')$的本征函数，只须对量子数α进行组合，同时解一个$a_{L,\lambda}$次的久期方程。解出的本征函数可记作

$$\Psi'(l^f[\lambda]IK_ILM_LSM_S)$$

$$=\sum_{\alpha=1}^{a_{L,\lambda}} c_{\alpha,IK_I}\Psi(l^f[\lambda]\alpha LM_LSM_S)$$

(40.17)

其能量$E(l^f,I,L,S)$关于K_I、M_L、M_S的简并的，简并度为$w(I)(2L+1)(2S+1)$，$w(I)$为K_I的值的个数。

我们看到，即使在完全略去$\hat{H}$中与自旋有关的项时，原子的能级仍然与量子数S有关。这一点并不足怪，因为原子能级除与L有关外，显然还与$[\lambda]$有关（见(40.12)），但Ψ的总反称性又要求$[\lambda]$（通过$[\tilde{\lambda}]$）与S相关。所以从物理上说，这一现象也可以被理解为是一种全同性效应。

在LS耦合方案中，最后考虑的微扰项是$\hat{H}$中与自旋有关的部分$\hat{H}_2'$。这时，$SO(3)_r$和$SO(3)_s$已不是$\hat{H}_2'$的对称群，例如象$\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$这样的算子在单独转动空间变量或单独转动自旋变量的操作下，都不是不变的。这时的对称群是同时转动空间变量和自旋变量的转动群$SO(3)$（总角动量守恒）。显然，$SO(3)$是$SO(3)_r\times SO(3)_S$的子群。因而可以说，$\hat{H}_2'$使体系的对称性由$SO(3)_r\times SO(3)_S$下降到$SO(3)$。

对给定的α，(40.15)按$SO(3)_r\times SO(3)_S$的不可约表示

$$D^{(L)}\otimes D^{(S)} \tag{40.18}$$

变换。这个表示作为子群$SO(3)$的表示时，它是$SO(3)$的两个不可约表示的直积，其约化公式便是熟知的$SO(3)$的C——G级数

$$D^{(L)}\otimes D^{(S)}=\sum_{J=|L-S|}^{L+S}\oplus D^{(J)} \tag{40.19}$$

而 $D^{(J)}$ 的不可约基应由(40.15)经 $SO(3)$ 的C——G系数 $(LM_LSM_S|JM_J)$ 对量子数 M_L 和 M_S 进行组合得出：

$$\Theta(l^f[\lambda]\alpha LSJM_J) = \sum_{M_L,M_S}(LM_LSM_S|JM_J)\Psi(l^f[\lambda]\alpha LM_LSM_S) \tag{40.20}$$

这便是 LS 耦合的分类基，J 和 M_J 分别是体系总角动量量子数和投影量子数。

由(40.20)确定的，也是 $\hat{H}_0$ 的属于能量 $E_0(l^f)$ 的总反称波函数的一个正交归一的完备系。它与(40.17)比较，是更为优越的总反称基。在这组基下，不仅 $\hat{H}_1'$ 是部分对角化的，$\hat{H}_2'$ 也是部分对角化的。事实上，$\hat{H}_1'$ 关于量子数 L、S、J、M_J 是对角化的；$\hat{H}_2'$ 关于量子数 J、M_J 是对角化的。因 $\hat{H}_2' \ll \hat{H}_1'$，在微扰近似下，$\hat{H}_2'$ 在属于 $\hat{H}_1'$ 的不同能级的量子数(L, S)之间矩阵元可略去，故 $\hat{H}_2'$ 关于量子数 L、S 也可认为是对角化的。

将(40.20)中的 Ψ 用(40.17)中的 Ψ' 来代替，得出的 Θ' 可写为

$$\Theta'(l^f[\lambda]IK_ILSJM_J) = \sum_{\alpha=1}^{a_{L,\lambda}} c_{\alpha,IK_I}\Theta(l^f[\lambda]\alpha LSJM_J) \tag{40.21}$$

Θ' 与 Ψ' 一样，都是$(\hat{H}_0+\hat{H}_1')$的属于能量 $E(l^f, I, L, S)$ 的本征函数，但由于上述理由，Θ' 更接近于 $\hat{H}_2'$ 的本征函数。因 $\hat{H}_2'$ 在 Θ' 下关于 I、L、S、J、M_J 已对角化，故由 Θ' 组合出 $\hat{H}_2'$ 的本征函数时，只需对 K_I 进行组合，并求解一个 $w(I)$ 次的久期方程。

40.3 $D^{[\lambda]}$的 L 结构与原子谱项

在上节中已看到，由于波函数的总反称性的要求，Ψ 中的

量子数L通过$[\lambda]$受限于量子数S。因而，谱项${}^{2S+1}L$中的L和S不是彼此独立的，即在由组态$(nl)^f$（简记l^f）所能耦合出来的所有（L，S）当中，只有一部分给出谱项。从前一节的讨论可知，要确定由组态l^f所产生的全部谱项，可先写出所有允许的S值。由f个自旋为$\frac{1}{2}$的电子自旋函数能耦合出的总S不会超过$f\cdot\frac{1}{2}$，再注意(40.16)，对S的限制可写为

$$S\leqslant\min\left\{\frac{f}{2}\ ,\ 2l+1-\frac{f}{2}\right\} \qquad (40.22)$$

由此可见，两个互补的组态l^f和l^{4l+2-f}，有相同的S值谱。对每个S，由

$$[\lambda]=[2^{\frac{f}{2}-S}1^{2S}] \qquad (40.23)$$

确定$[\lambda]$，再由

$$D^{[\lambda]}|_{SO(3)}=\sum_L a_{L,\lambda}D^{(L)} \qquad ((40.11))$$

定出与S相匹配的所有L值。所以，问题归结为求$D^{[\lambda]}$的L结构(40.11)，亦即

$$SU(2l+1)\longrightarrow SO(3) \qquad (40.24)$$

的分支律。

求上述分支律时，以下两个事实可使问题得以简化。首先，在39.3节中已证明，满足(39.78)的两个台（称为互补的台）$[\lambda]$和$[\lambda']$，由它们所确定的$SU(2l+1)$的表示$D^{[\lambda]}$和$D^{[\lambda']}$，作为子群$SO(2l+1)$的表示是彼此等价的。$SO(3)$又是$SO(2l+1)$的子群，所以$D^{[\lambda]}$和$D^{[\lambda']}$作为$SO(3)$的表示也是彼此等价的。由此得出：

若$[\lambda]$与$[\lambda']$互补，则$D^{[\lambda]}$和$D^{[\lambda']}$有相同的L结构。

其次，不难求得$SU(2l+1)$的几个特殊表示的L结构。例

如，显然有

$$D^{[0]}|_{SO(3)}=D^{(0)} \tag{40.25}$$

$$D^{[1]}|_{SO(3)}=D^{(l)} \quad ((40.10))$$

而$D^{[2]}$和$D^{[11]}$的L结构可如下求得。由(39.98)知$D^{[1]}\otimes D^{[1]}=D^{[2]}\oplus D^{[1^2]}$，从而有

$$D^{[2]}|_{SO(3)}\oplus D^{[1^2]}|_{SO(3)}=D^{(l)}\otimes D^{(l)}=\sum_{L=0}^{2l}D^{(L)} \tag{40.26}$$

另一方面，由$D^{(l)}\otimes D^{(l)}$产生的$D^{(L)}$的不可约基对S_2是有一定的置换对称性的。我们有相应的基矢耦合公式

$$\Phi_{LM}(1,2)=\sum_{m_1,m_2}(lm_1lm_2|LM)\varphi_{lm_1}(1)\varphi_{lm_2}(2)$$

置换Φ中的1和2，相当于置换和号下的m_1和m_2。但由(22.46)的对称性1°可得

$$(lm_2lm_1|LM)=(-1)^L(lm_1lm_2|LM)$$

从而有

$$\Phi_{LM}(2,1)=(-1)^L\Phi_{LM}(1,2) \tag{40.27}$$

可见，当L为偶数时，$D^{(L)}$的基有置换对称性[2]；当L为奇数时，$D^{(L)}$的基有置换对称性$[1^2]$。由此和(40.26)推知

$$D^{[2]}|_{SO(3)}=D^{(0)}\oplus D^{(2)}\oplus\cdots\oplus D^{(2l)} \tag{40.28}$$

$$D^{[1^2]}|_{SO(3)}=D^{(1)}\oplus D^{(3)}\oplus\cdots\oplus D^{(2l-1)} \tag{40.29}$$

从上述已知事实出发，并利用关于$SU(2l+1)$的C——G级数的图形法则，便可逐步地求得其他表示的L结构。

对$SU(2l+1)$的不可约表示$D^{[\lambda]}$，以下我们直接用杨图$[\lambda]$来标记，这只是为了简便，请注意不要与置换群的表示混淆。我们可以只求出列数≤2且行数≤$2l$（即$\lambda_{2l+1}=0$）的$[\lambda]$的L结构。此外，对于两个互补的组态，它们的$[\lambda]$显然也是两两互补的（见图40.2）：

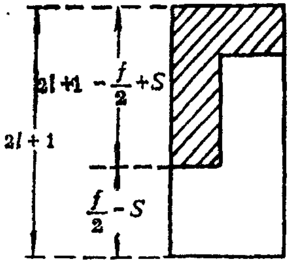


图 40.2　互补组态的[λ]

所以，互补的组态具有相同的谱项。因此，对每一壳层 l，只需求出非超半满组态

$$f \leqslant 2l+1 \tag{40.30}$$

的谱项。与此相应的，可只求满足(40.30)的[λ]的 L 结构。

例 1　$SU(3) \longrightarrow SO(3)$ 的分支律与 p 壳层

对 $SU(3)$，即 $l=1$ 的情形，列数 $\leqslant 2$ 且行数 $\leqslant 2$ 以及 $f \leqslant 3$ 的[λ]只有：[0]，$[1]$，$[1,1]$，$[2]$，$[2,1]$。其中前四个 L 结构已由(40.25)、(40.10)、(40.28)、(40.29)给出，即

$$[0]:0;\quad [1]:1;\quad [1,1]:1;\quad [2]:0,2\quad([1] 和 [1,1]$$

互补)。为了求 $[2,1]$ 的 L 结构，作

$$[1,1]\otimes[1] = [1,1,1]\oplus[2,1]$$

但已知 $[1,1]\otimes[1]:0,1,2$；$[1,1,1]\ \underset{\smile}{\overset{SO(3)}{}}\ [0]:0$；从而得

 : 1 , 2

用原子态的符号S，P，D，…来表示L的值0, 1, 2, …，可将关于以上五个表示的$SU(3)\longrightarrow SO(3)$分支律列于下表

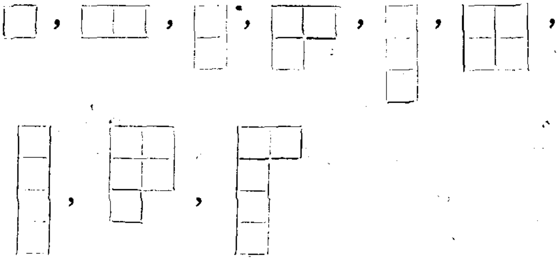
$SU(3)$	$SO(3)$
[0]	S
[1]	P
[2]	S, D
[1^2]	P
[21]	P, D

利用此表即可写出$p(l=1)$壳层各组态l^f的谱项（超半满组态完全重复其互补组态的情形，故不必列出）。对$f=1,2,3$三个组态，由单电子自旋耦合出的S值都满足(40.22)；再用(40.23)，并注意$[1^3]\underset{\sim}{\overset{SU(3)}{}}[0]$，即可得下表：

f	S	[λ]	L	谱　项
1	$\frac{1}{2}$	[1]	P	^2P
2	0	[2]	S, D	^1S, ^1D
	1	[1^2]	P	^3P
3	$\frac{1}{2}$	[21]	P, D	^2P, ^2D
	$\frac{3}{2}$	[1^3]	S	^4S

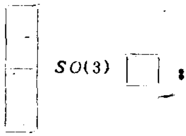
例 2　$SU(5)\longrightarrow SO(3)$的分支律与$d$壳层

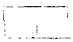
对$SU(5)$，即$l=2$的情形，列数≤2、行数≤4、次数$f\leqslant5$的台[λ]有

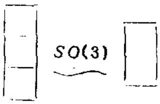
[0], 

由已知公式可写出下列表示的L结构

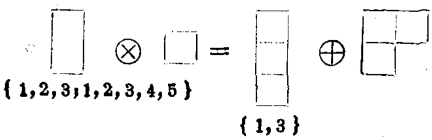
[0] : 0

 : 2

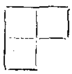
 : 0, 2, 4

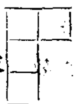
 : 1, 3

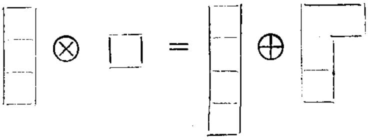
为求  的L结构，作



得出

 : 1, 2, 2, 3, 4, 5

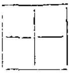
为求  的L结构，作



{1,2,3;1,2,3,4,5}　　{2}

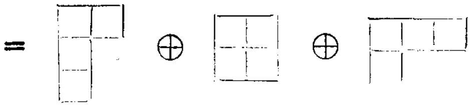
得出

 : 1, 1, 2, 3, 3, 4, 5

为求  的L结构，作

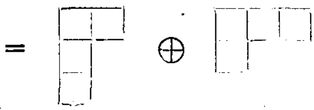


{1,2,3;0,1,2,3,4;0,1,2,3,4;1,2,3,4,5;2,3,4,5,6;3,4,5,6,7}

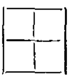




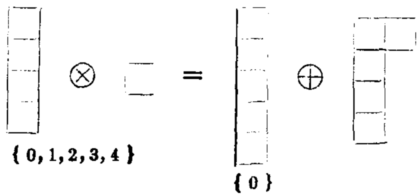
{1,3;1,2,3;1,2,3,4,5;3,4,5;1,2,3,4,5,6,7}

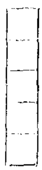


比较得出

 : 0, 0, 2, 2, 3, 4, 4, 6

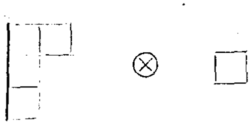
为求  的L结构，作



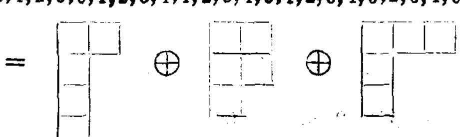
得（用到  $\overset{SU(5)}{\sim}$ [0]）

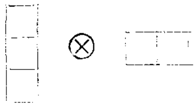
 ; 1, 2, 3, 4

为求  的L结构，作

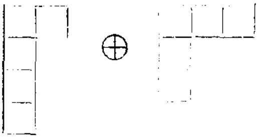


{1, 2, 3; 1, 2, 3; 0, 1, 2, 3, 4; 1, 2, 3, 4, 5; 1, 2, 3, 4, 5; 2, 3, 4, 5, 6; 3, 4, 5, 6, 7}





{ 1;3;1,2,3;1,2,3,4,5;3,4,5;1,2,3,4,5,6,7 }

= 

比较得出

 ; 0，1，2，2，2，3，3，4，4，5，6

以上的推演中用到一个显然的事实，即两个 $[\lambda]$ 的直积 $[\lambda]\otimes[\lambda']$ 的 L 结构可由二者的 L 结构按角动量的耦合法则作出。上面每个直积下的花括号内的数字，就是这样耦合出的所

$SU(5)$	$SO(3)$						
	S	P	D	F	G	H	I
$[0]\sim[1^5]$	1						
$[1]\sim[1^4]$			1				
$[2]$	1		1		1		
$[1^2]\sim[1^3]$		1		1			
$[21]$		1	2	1	1	1	
$[2^2]$	2		2	1	2		1
$[21^2]$		2	1	2	1	1	
$[2^21]$	1	1	3	2	2	1	1
$[21^3]$		1	1	1	1		

有 L 值，它标示这个直积的 L 结构。

可将上面作出的 $SU(5)\longrightarrow SO(3)$ 的部分分支律列成上表。

利用此表容易写出 d $(l=2)$ 壳层各个不超过半满的组态 $l^f(f=1,2,3,4,5)$ 的谱项，结果如下表。

f	S	$[\lambda]$	L	谱　　项
1	$\frac{1}{2}$	[1]	D	^2D
2	0	[2]	S D G	^1S ^1D ^1G
	1	[1^2]	P F	^3P ^3F
3	$\frac{1}{2}$	[21]	P $2D$ F G H	^2P ^2D ^2D ^2F ^2G ^2H
	$\frac{3}{2}$	[1^3]	P F	^4P ^4F
4	0	[2^2]	$2S$ $2D$ F $2G$ I	^1S ^1S ^1D ^1D ^1F ^1G ^1G ^1I
	1	[21^2]	$2P$ D $2F$ G H	^3P ^3P ^3D ^3F ^3F ^3G ^3H
	2	[1^4]	D	^5D
5	$\frac{1}{2}$	[2^21]	S P $3D$ $2F$ $2G$ H I	^2S ^2P ^2D ^2D ^2D ^2F ^2F ^2G ^2G ^2H ^2I
	$\frac{3}{2}$	[21^3]	P D F G	^4P ^4D ^4F ^4G
	$\frac{5}{2}$	[1^5]	S	^6S

40.4 波函数的构造方案　亲态比

在前面的讨论中，对于谱项波函数 Ψ 以及 Φ、Ω，我们只

是指出了原则性的构造方案，现在返回来对此问题进行更为具体的研究。

构造波函数的实际目的，是用它来计算力学量的矩阵元。在多体问题中，通常碰到的力学量是单体或二体算子的组合，要计算的就是这种单体或二体算子的矩阵元。这时，用下面介绍的亲态比方法来构造波函数，将使矩阵元的计算大为简化。这个方法的要点在于，通过将组态 l^{f-1}（或 l^{f-2}）的谱项函数与单粒子组态 l^1（或双粒子组态 l^2）的谱项函数相耦合的方式，来构成组态 l^f 的谱项函数。

先考虑空间函数 Φ，现在需要标明粒子的标号了，可以将这些标号写成 Φ 的下标。组态 l^{f-1} 的空间函数的一个完备系可由

$$\Phi_{12\cdots f-1}(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L'M_L'(r'))$$

给出。将 l 壳层上的第 f 个电子的空间函数（组态 l^1 的空间函数）$\varphi_f(lm)$ 乘上去，得出的

$$\Phi_{12\cdots f-1}(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L'M_L'(r'))\varphi_f(lm) \qquad (40.31)$$

则给出组态 l^f 的空间波函数的一个完备系。组态 l^f 的空间波函数 $\Phi(l^f[\lambda]\alpha LM_L(r))$ 是这个完备系的线性组合。为了计算其中的组合系数，先将完备系按 $SO(3)_r$ 分类，这可由已知的 C——G 系数对其进行组合得出

$$\begin{aligned}&[\Phi_{12\cdots f-1}(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L'(r'))\varphi_f(l)]^L_{M_L}\\&=\sum_m(L'M_L-mlm\mid LM_L)\\&\quad\Phi_{12\cdots f-1}\cdot(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L'M_L-m(r'))\varphi_f(lm)\end{aligned} \qquad (40.32)$$

(40.32) 仍是组态 l^f 的空间波函数的完备系，而 $\Phi(l^f[\lambda]\alpha LM_L(r))$ 是(40.32)的一个线性组合。

$\Phi(l^f[\lambda]\alpha LM_L(r))$ 在群 S_f 下按不可约表示 $[\lambda]$ 的第 $(r)=(r_f,r_{f-1},\cdots,r_1)$ 列变换，在子群 S_{f-1} 下按不可约表示

$$[\lambda']=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_{r_f}-1,\cdots,\lambda_{f-1}] \qquad (40.33)$$

的第

$$(r')=(r_{f-1},r_{f-2},\cdots,r_1) \qquad (40.34)$$

列变换，在群 $SO(3)_r$ 下按不可约表示 $D^{(L)}$ 的第 M_L 列变换。另一方面，(40.31)也是 $S_{f-1}\times SO(3)_r$ 的不可约基。由关于不可约基的正交性定理知，在 Φ 对 (40.32) 的展开式中，只能含有具有确定量子数 $[\lambda']$、(r')、L、M_L 的基矢，且展开系数与量子数 (r') 和 M_L 无关。于是有

$$\begin{aligned}&\Phi_{12\cdots f}(l^f[\lambda]\alpha LM_L(r))\\&=\sum_{\alpha'L'}(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L';l\,|\}l^f[\lambda]\alpha L)\\&\quad\cdot[\Phi_{12\cdots f-1}(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L'(r'))\varphi_f(l)]^L_{M_L} \qquad (40.35)\end{aligned}$$

上式右边的“态”是由左边的各“态”经线性组合生成的，因而也称后者为前者的亲态。在生成右边的“子态”时，各个亲态的贡献（权重）一般是不同的，这反映在组合中各亲态的系数上。所以通常将 (40.35) 中的系数 $(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L';l\,|\}l^f[\lambda]\alpha L)$ 称为亲态比系数。

总之，由 (40.31) 形的函数构造函数 $\Phi_{12\cdots f}$，需经两次组合(40.32)和(40.35)，其中第一次组合的系数是已知的C——G系数，第二次组合的系数是待定的亲态比系数。因而问题归结为计算亲态比系数。这些系数是由下述条件限定的，即它们必须使组合(40.35)按 S_f 的不可约表示 $[\lambda]$ 的标准矩阵变换。S_f 的生成元可取为(12),(23),…,$(f-1,f)$。其中前$(f-2)$个生成元是子群 S_{f-1} 的元，对于这些元(40.35)中的亲态已经具有“子态”的变换性质，因而对亲态比系数没有任何限制。所以限定亲态比系数的条件可简化为：(40.35)在对换$(f-1,f)$作用下，按$[\lambda]$的标准矩阵变换。可以利用这个条件来计算亲态比系数。

例 用亲态比方法构造组态 p^3 的空间波函数 $\Phi(p^3[\lambda]L M_L(r))$。

组态 p^3 的空间波函数是 $3^3=27$ 维的，但由于有用的 $\Phi(p^3[\lambda]LM_L(r))$ 限于 $[\lambda]$ 的列数 $\leqslant 2$，故只有17个（参见 $SU(3)\longrightarrow SO(3)$ 的分支律表）

$$\Phi(p^3[1^3]\quad 0\quad 0\ (321))$$

$$\Phi\left(p^3[21]\quad 1\quad \begin{matrix}1\\0\\-1\end{matrix}\begin{matrix}(211)\\(121)\end{matrix}\right)$$

$$\Phi\left(p^3[21]\quad 2\quad \begin{matrix}2\\1\\0\\-1\\-2\end{matrix}\begin{matrix}(211)\\(121)\end{matrix}\right)$$

p^3 组态的完备系(40.31)可写为

$$\Phi_{12}\left(p^2[1^2]\ 1\ \begin{matrix}1\\0\\-1\end{matrix}\right)\varphi_3\left(1\ \begin{matrix}1\\0\\-1\end{matrix}\right),\quad \Phi_{12}(p^2[2]00)\varphi_3\left(1\ \begin{matrix}1\\0\\-1\end{matrix}\right),$$

$$\Phi_{12}\left(p^2[2]2\ \begin{matrix}2\\1\\0\\-1\\-2\end{matrix}\right)\varphi_3\left(1\ \begin{matrix}1\\0\\-1\end{matrix}\right)$$

共有 $3\times3+1\times3+5\times3=27$ 个函数。其中 Φ_{12} 的 $[\lambda]$ 对 L 的制约是由上节给出的法则确定的，因这里的 $[\lambda]$ 都是一维的，故略去了量子数 (r)。Φ_{12} 是由前两个电子的单电子空间波函数用 C——G 系数组合出的。这个函数系经第一步组合(40.32)，又化为

$$[\Phi_{12}(p^2[1^2]1)\varphi_3(1)]^0_0,\ [\Phi_{12}(p^2[1^2]1)\varphi_3(1)]^1_{M_1},$$

$$[\Phi_{12}(p^2[1^2]1)\varphi_3(1)]^2_{M_2}$$

$$[\Phi_{12}(p^2[2]0)\varphi_3(1)]^1_{M_1}$$

$$[\Phi_{12}(p^2[2]2)\varphi_3(1)]^1_{M_1},$$

$$[\Phi_{12}(p^2[2]2)\varphi_3(1)]^2_{M_2},\quad [\Phi_{12}(p^2[2]2)\varphi_3(1)]^3_{M_3}$$

还是27个函数，是p^3组态空间函数的按总轨角动量分类的完备系。

$\Phi(p^3[1^3]00(321))$的亲态必须有对称性$[\lambda]=[1^2]$和$L=0$（见(40.33)和(40.34)），故它有唯一的亲态$[\Phi_{12}(p^2[1^2]1)\cdot\varphi_3(1)]^0_0$；$\Phi(p^3[21]1M_1(211))$的亲态须有对称性$[\lambda]=[2]$，$L=1$，故它有两个亲态$[\Phi_{12}(p^2[2]0)\varphi_3(1)]^1_{M_1}$和$[\Phi_{12}(p^2[2]2)\cdot\varphi_3(1)]^1_{M_1}$；$\Phi(p^3[21]1M_1(121))$的亲态须有对称性$[\lambda]=[1^2]$，$L=1$，故它只有一个亲态$[\Phi_{12}(p^2[1^2]1)\varphi_3(1)]^1_{M_1}$。其余的$\Phi$也都只有一个亲态。显然，当亲态唯一时，亲态比系数等于1。于是得出

$$\Phi_{123}(p^3[1^3]00(321))=[\Phi_{12}(p^2[1^2]1)\varphi_3(1)]^0_0$$

$$\Phi_{123}(p^3[21]1M_1(211))=a[\Phi_{12}(p^2[2]0)\varphi_3(1)]^1_{M_1}+b[\Phi_{12}(p^2[2]2)\varphi_3(1)]^1_{M_1}$$

$$\Phi_{123}(p^3[21]1M_1(121))=[\Phi_{12}(p^2[1^2]1)\varphi_3(1)]^1_{M_1}$$

$$\Phi_{123}(p^3[21]2M_2(211))=[\Phi_{12}(p^2[2]2)\varphi_3(1)]^2_{M_2}$$

$$\Phi_{123}(p^3[21]2M_2(121))=[\Phi_{12}(p^2[1^2]1)\varphi_3(1)]^2_{M_2}$$

可见，需计算的亲态比系数只有

$$a=(p^2[2]0;1\,|\}\,p^3[21]1)$$

$$b=(p^2[2]2;1\,|\}\,p^3[21]1)$$

a和b可如下计算。已知

$$[21]:(23)=\begin{pmatrix}-\dfrac{1}{2} & \dfrac{\sqrt{3}}{2}\\ \dfrac{\sqrt{3}}{2} & \dfrac{1}{2}\end{pmatrix}$$

从而

$$(23)\Phi_{123}(p^3[21]1M_1(121))$$

$$=\frac{\sqrt{3}}{2}\Phi_{123}(p^3[21]1M_l(211))+\frac{1}{2}\Phi_{123}(p^3[21]1M_l(121))$$

$$=\frac{\sqrt{3}}{2}a[\Phi_{12}(p^2[2]0)\varphi_3(1)]^1_{M_1}+\frac{\sqrt{3}}{2}b[\Phi_{12}(p^2[2]2)\varphi_3(1)]^1_{M_1}$$

$$+\frac{1}{2}\Phi_{12}(p^2[1^2]1)\varphi_3(1)]^1_{M_1}$$

另一方面又有

$$(23)\Phi_{123}(p^3[21]1M_l(121))=(23)[\Phi_{12}(p^2[1^2]1)\varphi_3(1)]^1_{M_1}$$

$$=(23)[\{\varphi_1(1)\varphi_2(1)\}^1\varphi_3(1)]^1_{M_1}=[\{\varphi_1(1)\varphi_3(1)\}^1\varphi_2(1)]^1_{M1}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{3}}[\{\varphi_1(1)\varphi_2(1)\}^0\varphi_3(1)]^1_{M_1}+\frac{1}{2}[\{\varphi_1(1)\varphi_2(1)\}^1\varphi_3(1)]^1_{M1}$$

$$-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{3}}[\{\varphi_1(1)\varphi_2(1)\}^2\varphi_3(1)]^1_{M_1}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{3}}[\Phi_{12}(p^2[2]0)\varphi_3(1)]^1_{M_1}+\frac{1}{2}[\Phi_{12}(p^2[1^2]1)\varphi_3(1)]^1_{M_1}$$

$$-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{3}}[\Phi_{12}(p^2[2]2)\varphi_3(1)]^1_{M_1}$$

其中用到了三个角动量耦合时不同耦基之间变换的拉卡系数。对比以上二式便得出

$$a=\frac{2}{3}\ ,\ b=-\frac{\sqrt{5}}{3}$$

上面讨论了关于空间函数的亲态比系数，可按同样的方法讨论自旋函数的构造。对自旋函数来说，量子数S是由$[\tilde{\lambda}]$单值确定的，而且不存在量子数α（见(40.14)）。因而，自旋函数$\Omega_{12\cdots f}([\tilde{\lambda}]SM_s(\tilde{r}))$的亲态的量子数

$$[\tilde{\lambda}']=[\tilde{\lambda}_1,\tilde{\lambda}_2,\cdots,\tilde{\lambda}_{r_f}-1,\cdots,\tilde{\lambda}_{f-1}] \tag{40.36}$$

$$(\tilde{r}')=(\tilde{r}_{f-1},\tilde{r}_{f-2},\cdots,\tilde{r}_1) \tag{40.37}$$

以及S'（通过$[\tilde{\lambda}']$）都是确定的。这说明$\Omega_{12\cdots f}$的亲态是唯一

的，相应的亲态比系数等于1。即有：

$$\Omega_{12\cdots f}([\tilde{\lambda}]SM_s(\tilde{r}))=[\Omega_{12\cdots f-1}([\tilde{\lambda}']S'(\tilde{r}'))\omega_f]^S_{M_s}$$

$$=\sum_{m_s}(S'M_s-m_s\frac{1}{2}m_s|SM_s)\,\Omega_{12\cdots f-1}([\tilde{\lambda}']S'M_s$$

$$-m_s\cdot(\tilde{r}'))\omega_f(m_s) \qquad (40.38)$$

这表明，从第一个电子的自旋函数开始，按角动量耦合公式逐次将第二、第三、…个电子的自旋函数耦合上去，得出的函数就是置换群的不可约表示的标准基。

将(40.35)和(40.38)代入(40.15)得

$$\Psi_{12\cdots f}(l^f[\lambda]\alpha LM_LSM_s)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{n[\lambda]}}\sum_{(r)}(-1)^{\delta_r}\sum_{\alpha'L'}(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L';l|\}l^f[\lambda]\alpha L)$$

$$\cdot[\Phi_{12\cdots f-1}(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L'(r'))\varphi_f(l)]^L_{M_L}$$

$$\cdot[\Omega_{12\cdots f-1}([\tilde{\lambda}']S'(\tilde{r}'))\omega_f]^S_{M_S}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{n[\lambda]}}\sum_{(r)}(-1)^{\delta_r}\sum_{\alpha'L'}(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L';l|\}l^f[\lambda]\alpha L)$$

$$\cdot[\Phi_{12\cdots f-1}(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L'(r'))$$

$$\cdot\Omega_{12\cdots f-1}([\tilde{\lambda}']S'(\tilde{r}'))\varphi_f(l)\omega_f]^{LS}_{M_LM_S}$$

式中对(r)的求知，(r)取遍$[\lambda]$的标准盘，显然可写为

$$\sum_{(r)}=\sum_{[\lambda']}\sum_{(r')} \qquad (40.39)$$

$[\lambda']$是从$[\lambda]$上去掉一个格而生成的$(f-1)$次台，实际上每个$[\lambda]$至多生成两个$[\lambda']$，如图40.3所示。这两个$[\lambda']$相应于数码f在(r)的标准盘中的位置的两种可能的情形：第一列的最下方或第二列的最下方。在第一种情形，$(r_fr_{f-1}\cdots r_1)$与$(r_{f-1}\cdots r_1)$的反序数对的个数相等（r_f是r_i中最大者），故有$\delta_r=\delta_{r'}$；在第二种情形，有$2S$个r_i大于r_f，$(r_fr_{f-1}\cdots r_1)$

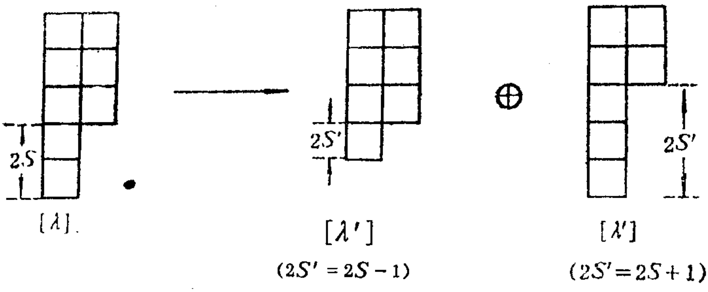


图 40.3 [λ]的约化

中的反序数对比 $(r_{f-1}\cdots r_1)$ 多 $2S$ 个，故有 $\delta_r = 2S + \delta_{r'}$. 又在两种情形下分别有：$(2S-2S') = 1$ 和 $(2S-2S') = -1$，所以综合起来得

$$(-1)^{\delta_r} = (2S-2S')^{2S}\cdot(-1)^{\delta_{r'}} \tag{40.40}$$

再注意求和号 $\sum_{(r')}$ 和组合号 $[\quad]^{L}_{M_L}{}^{S}_{M_S}$ 可以交换次序，最后得出

$$\Psi_{12\cdots f}(l^f[\lambda]\alpha LM_LSM_S)$$
$$= \sum_{[\lambda']\alpha'L'}(2S-2S')^{2S}\sqrt{\frac{n[\lambda']}{n[\lambda]}}(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L';l|\}l^f[\lambda]\alpha L)[\Psi_{12\cdots f-1}(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L'S')\varphi_f(l)\omega_f]^{L}_{M_L}{}^{S}_{M_S} \tag{40.41}$$

这就是总反称函数的亲态比展开式。此结果表明，总亲态比系数可由空间函数的亲态比系数给出

$$\left(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L'S';l\frac{1}{2}\middle|\right\}l^f[\lambda]\alpha LS\Big)$$
$$=(2S-2S')^{2S}\sqrt{\frac{n[\lambda']}{n[\lambda]}}(l^{f-1}[\lambda']\alpha'L';l|\}l^f[\lambda]\alpha L) \tag{40.42}$$

以上是用单电子函数 $\varphi_f(l)\omega_f$ 与组态 l^{f-1} 的函数 $\Psi_{12\cdots f-1}$ 相

耦合来构造组态l^f的函数$\Psi_{12\cdots f}$，亲态比系数(40.42)也称为单电子亲态比系数。完全类似的，也可用双电子的函数Ψ_{f-1f}与组态l^{f-2}的函数$\Psi_{12\cdots f-2}$相耦合来构造组态l^f的函数$\Psi_{12\cdots f}$，这时的亲态比系数称为双电子亲态比系数。不难证明，双电子亲态比系数可用单电子亲态比系数和拉卡系数来表示。

我们看到，亲态比系数可由一组线性方程来确定，而这组方程的系数为置换群不可约表示的标准矩阵元和拉卡系数（均为实数）。由此推知：所有亲态比系数都是实数。

40.5 量子数α的意义和选取

在总反称波函数Ψ当中，除了α以外，都是好量子数，因而在求能量的本征函数时，还得将Ψ对α重新组合。要进一步用群论来简化计算，需要研究如何选取这个参数。α是在将已按$SU(2l+1)$分类的空间波函数进一步按$SO(3)$分类时引入的。由40.3节中给出的$SU(3)\longrightarrow SO(3)$和$SU(5)\longrightarrow SO(3)$的部分分支律可见，对于整个$p$壳层，$\alpha$并不出现。对于$d$壳层，当$f\leqslant 2$时，$\alpha$也不出现；当$f=3$时，$D^{[21]}$中包含两个$D^{(2)}$，为了区分这两个$D$态，需要一个双值的量子数$\alpha$。$\alpha$是从组态$d^3$开始出现的。我们希望能够让$\alpha$标志某种对称性。如果能够找到一个群$G$，$SU(2l+1)\supset G\supset SO(3)$，使得在分支律$SU(2l+1)\longrightarrow G$和$G\longrightarrow SO(3)$中都不出现超过1的重复度，则$\alpha$便可取为$G$的不可约表示的标记。这时，例如在$D^{[21]}$中的两个$D$态将属于$G$的两个不等价的不可约表示。这就实现了空间波函数按下列群链的完全分类

$$\begin{array}{ccccccc} SU(2l+1) & \supset & G & \supset & SO(3) & \supset & SO(2) \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ [\lambda] & & \alpha & & L & & M_L \end{array} \tag{40.43}$$

但随着壳层指标l的增大，要满足上述的重复度不越过1的条

件是办不到的。所以一般地说，这只能将α部分地纳入G的不可约表示，要进一步处理剩余量子数，有时可在G和$SO(3)$之间再插入一个群。

在讨论如何寻求G之前，必须对群链（40.43）中的子群的含义加以说明。一个群可以有许多彼此同构的不同子群，它对于这些不同子群的分支律一般是不同的。例如在28.2节中讨论过的$SO(4)$，它的六个实参数（李代数的坐标）可取为（$\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$）或（$\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$），等等。由（28.24）——（28.33）可以看出，$\boldsymbol{b}=0$时的子群和$\boldsymbol{\beta}=0$时的子群都同构于$SO(3)$，暂记为$SO(3)_1$和$SO(3)_2$。考虑$SO(4)$的不可约表示$D^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}$，由（28.35）和（28.34）可得

$$D^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}\Big|_{SO(3)1}=D^{(\frac{1}{2})}(\boldsymbol{a})\otimes D^{(\frac{1}{2})}(\boldsymbol{a})=D^{(0)}\oplus D^{(1)}$$

$$D^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}\Big|_{SO(3)2}=D^{(\frac{1}{2})}(\boldsymbol{a})\otimes D^{(\frac{1}{2})}(0)=D^{(\frac{1}{2})}\oplus D^{(\frac{1}{2})}$$

可见$SO(4)\longrightarrow SO(3)_1$和$SO(4)\longrightarrow SO(3)_2$的分支律是不同的。所以，在群链中出现的子群的同构群的符号是不够明确的，必须明白这个同构群的符号所指的是哪一个子群。

在（40.24）和（40.43）中，用同构群$SO(3)$所表示的$SU(2l+1)$的子群，是由（40.10）确定的，实际上就是$(2l+1)\times$的矩阵群$D^{(l)}$。$SU(2l+1)$的另一个同构于$SO(3)$的子群可由$(2l+1)$所有形如

$$\begin{pmatrix} \times & \times & \times & & & & \\ \times & \times & \times & & & 0 & \\ \times & \times & \times & & & & \\ & & & 1 & & & \\ & & & & 1 & & \\ & 0 & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

的$(2l+1)\times(2l+1)$的实矩阵给出，这个子群是$SO(3)$的可约表示

$$D^{(1)}\oplus\underbrace{D^{(0)}\oplus D^{(0)}\oplus\cdots D^{(0)}}_{(2l-2)\text{个}}$$

与$D^{(l)}$不同。在群链(40.43)中的待定群G，必须是一个包含子群$D^{(l)}$而又小于$SU(2l+1)$的幺正矩阵群。或者，等效地讲，将矩阵群$SU(2l+1)$和$D^{(l)}$看作是定义于由基

$$\{\varphi_{-l},\ \varphi_{-l+1},\cdots,\ \varphi_l\} \tag{40.44}$$

所张成的$(2l+1)$维空间上的幺正算子群时，G也是这个空间上的包含$D^{(l)}$且小于$SU(2l+1)$的幺正算子群。

为了寻求G，我们来考查$SU(2l+1)$的李代数$su(2l+1)$。$SU(2l+1)$的元可写为$e^{-i\hat{v}}$，$\hat{v}$是作用于上述空间的零迹厄米算子。于是有

$$su(2l+1)=\{-i\hat{v}\} \tag{40.45}$$

我们希望在(40.45)中找出一组适当的基，使得其中的某三个基矢所张成的子代数生成群$D^{(l)}$。

注意到(40.44)是单电子轨道角动量的本征函数，由§22可知

$$D^{(l)}=\{e^{-i\hat{l}\cdot a}\} \tag{40.46}$$

$\hat{l}$是单电子的轨道角动量，其定义域限于(40.44)张成的空间(在子空间上的导出算子)。因而可取$\hat{l}$的分量为(40.45)的三个基矢。为了便于推广，可将这三个分量取为$SO(3)$的不可约张量算子

$$\hat{l}_1=-\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{l}_+\ ,\quad \hat{l}_{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{l}_-\ ,\quad \hat{l}_0=\hat{l}_z \tag{40.47}$$

将这组不可约张量算子“单位化”，得

$$\hat{u}_q^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{l(l+1)}}\hat{l}_q \qquad q=0,\ \pm 1 \qquad (40.48)$$

它们在(40.44)下的矩阵元为（利用(12.20)）

$$\langle m' | \hat{u}_q^{(1)} | m \rangle = (1qlm \mid lm') \qquad (40.49)$$

其约化矩阵元为1，故称为单位不可约张量算子。现在在(40.45)中选取包含 $\hat{u}_q^{(1)}$在内的共 $[(2l+1)^2-1]$ 个算子

$$\{\hat{u}_q^{(k)}: k=1,2,\cdots,2l,\ q=0,\pm 1,\cdots \pm k\} \qquad (40.50)$$

$\hat{u}_q^{(k)}$的定义是，作用于给定空间(40.44)上的$SO(3)$的单位不可约张量算子。按此定义，$\hat{u}_q^{(k)}$的约化矩阵元为1，从而有

$$\langle m' | \hat{u}_q^{(k)} | m \rangle = (kqlm \mid lm') \qquad (40.51)$$

如果再将单位算子 $\hat{u}_0^{(0)}$ 加进来，就有$(2l+1)^2$个算子。因这些算子按$SO(3)$的不等价的不可约表示变换，它们必是线性无关的。又，由(40.44)确定的$(2l+1)$维空间上的线性算子的集合，对于加法和数乘运算是一个$(2l+1)^2$维的线性空间。所以，作用于(40.44)上的任一线性算子都可展为(40.50)和$\hat{u}_0^{(0)}$的线性组合。$\hat{u}_0^{(0)}$的迹为$(2l+1)\neq 0$；而(40.50)中的$\hat{u}_q^{(k)}$的迹为

$$\sum_m \langle m | \hat{u}_q^{(k)} | m \rangle = \sum_m (kqlm \mid lm) = \sum_m (kqlm \mid lm)(00lm \mid lm)$$

$$= \frac{2l+1}{\sqrt{2k+1}} \sum_m (lml-m \mid kq)(lml-m \mid 00)$$

$$= \frac{2l+1}{\sqrt{2k+1}} \cdot \delta_{k0}\delta_{q0} = 0$$

其中用到了(22.46)及其对称性，以及C——G系数的正交性。对于迹为零的算子，将它的展开式的两边取迹，便可推知$\hat{u}_0^{(0)}$的系数等于零。所以，作用于(40.44)上的任一零迹算子，都可展为(40.50)的组合。特别地，(40.45)中的$\hat{O}$可写为

$$\hat{O} = \sum_{k,q} c_q^{(k)} \hat{u}_q^{(k)} \qquad (40.52)$$

$\hat{O}^+ = \hat{O}$ 要求

$$c_q^{(k)}=(-1)^q c_{-q}^{(k)*} \tag{40.53}$$

这是由于，由(40.51)和(22.46)的对称性易知

$$\hat{u}_q^{(k)+}=(-1)^q\hat{u}_{-q}^{(k)} \tag{40.54}$$

由(40.45)和(40.52)可见，(40.50)形成了群$SU(2l+1)$的一组生成元，其中$k=1$的三个生成元$\{\hat{u}_1^{(1)},\ \hat{u}_0^{(1)},\ \hat{u}_{-1}^{(1)}\}$生成子群$D^{(l)}$。即有

$$SU(2l+1)=\left\{e^{-i\sum\limits_{k,q}c_q^{(k)}\hat{u}_q^{(k)}}\right\} \tag{40.55}$$

$$D^{(l)}=\left\{e^{-i\sum\limits_{q}c_q^{(1)}\hat{u}_q^{(1)}}\right\} \tag{40.56}$$

需注意，这里的$c_q^{(k)}$是复数，且满足(40.53)。严格地讲，作为$[(2l+1)^2-1]$维的实李群，$SU(2l+1)$的参数应取为实数，与此相应的，其生成元应取为厄米算子。要作到这一点并不困难，只需作变换

$$\begin{cases} \hat{v}_0^{(k)}=\hat{u}_0^{(k)} \\ \hat{v}_q^{(k)}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\hat{u}_q^{(k)}+(-1)^q\hat{u}_{-q}^{(k)}]\quad,\quad q<0 \\ \hat{v}_q^{(k)}=\dfrac{i}{\sqrt{2}}[\hat{u}_q^{(k)}-(-1)^q\hat{u}_{-q}^{(k)}]\quad,\quad q>0 \end{cases} \tag{40.57}$$

便可得到厄米的生成元$\{\hat{v}_q^{(k)}\}$，而$\hat{v}$将是这些生成元的实系数组合

$$\hat{v}=\sum_{k,q}b_q^{(k)}\hat{v}_q^{(k)} \tag{40.58}$$

$$\hat{v}_q^{(k)+}=\hat{v}_q^{(k)} \tag{40.59}$$

$$b_q^{(k)*}=b_q^{(k)} \tag{40.60}$$

这时可将(40.55)和(40.56)写为

$$SU(2l+1)=\left\{e^{-i\sum\limits_{k,q}b_q^{(k)}\hat{v}_q^{(k)}}\right\} \tag{40.61}$$

$$D^{(l)}=\left\{e^{-i\sum_q b_q^{(1)}\hat{v}_q^{(1)}}\right\} \tag{40.62}$$

$[(2l+1)^2-1]$个$b_q^{(k)}$是$SU(2l+1)$的实参数。严格地讲，$\{\hat{u}_q^{(k)}\}$只是复李代数$sl(2l+1)$的基，$sl(2l+1)$由$\{\hat{u}_q^{(k)}\}$的所有复系数组合构成；而$\{\hat{v}_q^{(k)}\}$同时是$sl(2l+1)$和实代数$su(2l+1)$的基，$sl(2l+1)$由$\{\hat{v}_q^{(k)}\}$的所有复系数组合构成，$su(2l+1)$则由$\{\hat{v}_q^{(k)}\}$的所有实系数组合构成。但由于有(40.57)，在注意到以上所做说明的情况下，对$su(2l+1)$也可以采用基$\{\hat{u}_q^{(k)}\}$($SU(2l+1)$的生成元)，而这样作是较为方便的。

还需找出生成元$\{\hat{u}_q^{(k)}\}$的对易关系。注意到$\hat{u}_q^{(k)}\hat{u}_{q'}^{(k')}$在$SO(3)$下按表示$D^{(k)}\otimes D^{(k')}$变换，则可写

$$[\hat{u}^{(k)}\hat{u}^{(k')}]_Q^K=\sum_{qq'}(kqk'q'\,|KQ)\hat{u}_q^{(k)}\hat{u}_{q'}^{(k')} \tag{40.63}$$

利用C——G系数的正交性解出

$$\hat{u}_q^{(k)}\hat{u}_{q'}^{(k')}=\sum_{KQ}(kqk'q'\,|\,KQ)\,[\hat{u}^{(k)}\hat{u}^{(k')}]_Q^K \tag{40.64}$$

为了将$[\hat{u}^{(k)}\hat{u}^{(k')}]_Q^K$展为$\{\hat{u}_Q^{(K)}\}$的组合，我们计算它的矩阵元，有

$$\begin{aligned}
&\langle lm\,|[\hat{u}^{(k)}\hat{u}^{(k')}]_Q^K|\,lm'\rangle\\
&=\langle lm\,|\sum_{K'Q'}(KQlm'\,|\,K'Q')\{[\hat{u}^{(k)}\hat{u}^{(k')}]^K|\,l\rangle\}_{Q'}^{K'}\\
&=\sum_{K'Q'}(KQlm'\,|\,K'Q')\langle lm\,|\{[\hat{u}^{(k)}\hat{u}^{(k')}]^K|\,l\rangle\}_{Q'}^{K'}\\
&=\sum_{K'Q'}(KQlm'|\,K'Q')\delta_{lK'}\delta_{mQ'}\langle lm\,|\{[\hat{u}^{(k)}\hat{u}^{(k')}]^K|\,l\rangle\}_m^l\\
&=(KQlm'|\,lm)\langle lm\,|\{[\hat{u}^{(k)}\hat{u}^{(k')}]^K|\,l\rangle\}_m^l\\
&=\langle lm\,|\hat{u}_Q^{(K)}|\,lm'\rangle\cdot\langle lm\,|\{[\hat{u}^{(k)}\hat{u}^{(k')}]^K|\,l\rangle\}_m^l
\end{aligned}$$

从而得

$$[\hat{u}^{(k)}\hat{u}^{(k')}]_Q^K=\hat{u}_Q^{(K)}\cdot\langle lm\,|\{[\hat{u}^{(k)}\hat{u}^{(k')}]^K|\,l\rangle\}_m^l \tag{40.65}$$

又

$$[\hat{u}^{(k)}|l\rangle]^K_Q=\sum_{qm}(kqlm|KQ)\hat{u}^{(k)}_q|lm\rangle$$
$$=\sum_{qm}(kqlm|KQ)\sum_{m'}\langle lm'|\hat{u}^{(k)}_q|lm\rangle|lm'\rangle$$
$$=\sum_{qm}(kqlm|KQ)\sum_{m'}(kqlm|lm')|lm'\rangle$$
$$=\sum_{m'}\sum_{qm}(kqlm|KQ)(kqlm|lm')|lm'\rangle$$
$$=\sum_{m'}\delta_{Kl}\delta_{Qm'}|lm'\rangle$$

于是有

$$[\hat{u}^{(k)}|l\rangle]^K_Q=\delta_{lK}|lQ\rangle \tag{40.66}$$

由此可算出

$$\{[\hat{u}^{(k)}\hat{u}^{(k')}]^K|l\rangle\}^l_m=\sum_{K'}U(kk'll;KK')\{\hat{u}^{(k)}[\hat{u}^{(k')}|l\rangle]^{K'}\}^l_m$$
$$=U(kk'll;Kl)\{\hat{u}^{(k)}|l\rangle\}^l_m$$
$$=U(kk'll;Kl)|lm\rangle \tag{40.67}$$

其中，三个角动量的不同耦合方式之间的变换系数U，便是拉卡系数[25]。将(40.67)代入(40.65)，得到

$$[\hat{u}^{(k)}\hat{u}^{(k')}]^K_Q=U(kk'll;Kl)\hat{u}^{(K)}_Q \tag{40.68}$$

再代回(40.64)，便得出$\hat{u}^{(k)}_q\hat{u}^{(k')}_{q'}$对基$\{\hat{u}^{(K)}_Q\}$的展开式

$$\hat{u}^{(k)}_q\hat{u}^{(k')}_{q'}=\sum_K(kqk'q'|Kq+q')U(kk'll;kl)\hat{u}^{(K)}_{q+q'}, \tag{40.69}$$

同理

$$\hat{u}^{(k')}_{q'}\hat{u}^{(k)}_q=\sum_K(k'q'kq|Kq+q')U(k'kll;Kl)\hat{u}^{(K)}_{q+q'},$$
$$=\sum_K(-1)^{k+k'-K}(kqk'q'|Kq+q')U(kk'll;Kl)\hat{u}^{(K)}_{q+q'}, \tag{40.70}$$

其中用到(22.46)的对称性和拉卡系数的对称性：$U(kk'll;Kl)=U(k'kll;Kl)$。将以上两式相减，最后得出生成元$\{\hat{u}^{(k)}_q\}$的对易关系

$$[\hat{u}_q^{(k)}, \hat{u}_{q'}^{(k')}] = \sum_K [1-(-1)^{k+k'-K}] (kqk'q'|Kq+q') \cdot U(kk'll;Kl)\hat{u}_{q+q'}^{(K)} \tag{40.71}$$

生成元 $\{\hat{u}_q^{(k)}\}$ 的一个子集，如果对于(40.71)是封闭的，便是一个子群的生成元，它们张成那个子群的李代数。所以，寻找$SU(2l+1)$的子群的问题，现简化为寻找$su(2l+1)$的子代数，即寻求$\{\hat{u}_q^{(k)}\}$对于(40.71)的封闭子集的问题。例如，当$k=k'=1$时，由$(kqk'q'|Kq+q')$的三角条件知，(40.71)的和式中除了$K=0,1,2$的项外全为零，又由因子$[1-(-1)^{k+k'-K}]$看出，$K=0,2$的项也为零，因而只有$K=1$的一项。由此可见，$\{\hat{u}_{-1}^{(1)}, \hat{u}_0^{(1)}, \hat{u}_1^{(1)}\}$生成$SU(2l+1)$的一个子群，这便是同构于$SO(3)$的$D^{(l)}$。同理，$\hat{u}_0^{(1)}$又生成$D^{(l)}$的一个阿贝尔子群，同构于$SO(2)$。

当k和k'都是奇数时，由于因子$[1-(-1)^{k+k'-K}]$，在(40.71)的和式中只含有K为奇数的项。因而$\{\hat{u}_q^{(k)}: k=\text{奇数}\}$是$\{\hat{u}_q^{(k)}\}$的一个对于(40.71)的封闭子集，它生成$SU(2l+1)$的一个子群且包含着子群$D^{(l)}$。所以，以$\{u_q^{(k)}: k=\text{奇数}\}$为生成元的群便是我们所要寻找的(40.43)中的$G$。

为了确定由$\{\hat{u}_q^{(k)}: k=\text{奇数}\}$所张成的李代数的同构类型，考虑这些算子的矩阵形式。以$u_q^{(k)}$表示$\hat{u}_q^{(k)}$在基(40.44)下的矩阵，其阵元由(40.51)给出。因这些矩阵都是实的，由(40.54)有

$$\tilde{u}_q^{(k)} = (-1)^q u_{-q}^{(k)} \tag{40.72}$$

另一方面，考虑一个基矢变换，使基矢的次序倒转，即将$\varphi_m=|l,m\rangle$变为$\varphi_{-m}=|l,-m\rangle$，同时乘以$(-1)^m$。这个变换的矩阵是

$$S=\begin{pmatrix} & & & & & & & 1 \\ & 0 & & & & & -1 & \\ & & & & & \cdot^{\cdot^{\cdot}} & & \\ & & & & 1 & & & \\ & & & -1 & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & -1 & & & & & & \\ & 1 & & & & & & \\ & \cdot^{\cdot^{\cdot}} & & & & & 0 & \\ -1 & & & & & & & \\ 1 & & & & & & & \end{pmatrix} \tag{40.73}$$

显然有

$$S^2=I \qquad 或 \qquad S^{-1}=S \tag{40.74}$$

在这个变换下，$u_q^{(k)}$被变成$S^{-1}u_q^{(k)}S$，由(40.51)知，变换后的矩阵元为

$$\begin{aligned}(-1)^{m+m'}(kql-m|\,l-m') &= (-1)^{m+m'}(-)^k(k-qlm|\,lm') \\ &= (-1)^q(-1)^k(k-qlm|\,lm') = -(-1)^q(k-qlm|\,lm')\end{aligned} \tag{40.75}$$

其中已注意到，C——G系数中含有因子$\delta_{m',m-q}$，使$(-1)^{m+m'}=(-1)^{2m-q}=(-1)^{-q}=(-1)^q$，以及$k=$奇数，$(-1)^k=-1$。上式表明

$$S^{-1}u_q^{(k)}S=-(-1)^q u_{-q}^{(k)} \tag{40.76}$$

比较(40.72)和(40.76)，得到

$$\tilde{u}_q^{(k)}=-S^{-1}u_q^{(k)}S \qquad (k=奇数) \tag{40.77}$$

存在满秩矩阵P，例如

$$P=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & & & 0 & & & i \\ & 1 & & & & i & \\ & & \ddots & & \cdot^{\cdot^{\cdot}} & & \\ & & 1 & & i & & \\ 0 & & & \sqrt{2} & & & 0 \\ & & -1 & & i & & \\ & & \cdot^{\cdot^{\cdot}} & & \ddots & & \\ & -1 & & & & i & \\ 1 & & & 0 & & & -i \end{pmatrix} \tag{40.78}$$

使

$$S=P\tilde{P} \tag{40.79}$$

代入(40.77)得

$$\widetilde{P^{-1}u_q^{(k)}P}=-P^{-1}u_q^{(k)}P$$

令

$$w_q^{(k)}=P^{-1}u_q^{(k)}P \tag{40.80}$$

则前式可写为

$$\tilde{w}_q^{(k)}=-w_q^{(k)} \qquad (k=\text{奇数}) \tag{40.81}$$

上式表明$k=$奇数的$w_q^{(k)}$都是反对称矩阵。所以，由$\{w_q^{(k)}: k=$奇数$\}$所张成的李代数是一个由反对称矩阵构成的矩阵代数。又，基$w_q^{(k)}$的个数等于$(2l^2+l)$，这正是所有$(2l+1)\times(2l+1)$的反对称矩阵的矩阵代数的维数。因而，由$\{w_q^{(k)}: k=$奇数$\}$张成的代数，就是全体$(2l+1)\times(2l+1)$的反对称矩阵的代数，这便是$so(2l+1,C)$。

由(40.80)可知，分别由$u_q^{(k)}$和$w_q^{(k)}$张成的两个矩阵代数是彼此同构的。于是得知，$\{\hat{u}_q^{(k)}: k=$奇数$\}$张成的李代数的同构类型是$so(2l+1,C)$。其紧实形为$so(2l+1)$，可由限制条件(40.52)、(40.53)或(40.57)、(40.58)、(40.60)确定。所以，在上述限制条件下，由$\{\hat{u}_q^{(k)}: k=$奇数$\}$所生成的作用于空间(40.44)上的算子群G，同构于实正交矩阵群$SO(2l+1)$。群链(40.43)可写为

$$SU(2l+1)\supset SO(2l+1)\supset SO(3)\supset SO(2) \tag{40.82}$$

$SO(2l+1)$的不可约表示可用其首权$(\omega)=(\omega_1,\omega_2,\cdots,\omega_l)$来标记，因此可将参数$\alpha$（至少部分地）取为$(\omega)$。当$l=0,1,2$时，所需要的$SU(2l+1)\longrightarrow SO(2l+1)$和$SO(3)$的部分分支律中，没有超过1的重复度，因而$\alpha$就是$(\omega)$。所以群

链(40.82)可对 s 、p 、d 三个壳层实行完全地分类。例如，对组态 d^3，$[\lambda]=[21]\left(S=\frac{1}{2}\right)$时的两个$D(L=2)$态，可以用$SO(5)$的两个表示$(\omega)=(10)$和$(21)$来区分，等等。但当$l\geqslant 3$时，即从 f 壳层开始，上述分支律中将开始出现超过1的重复度。这时参数 α 只能部分地由(ω)取代，除了(ω)之外 α 中还需包含区分那些重复出现的表示的标记。所以，群链(40.82)对 $l\geqslant 3$ 的壳层的态的分类是不完全的，这时为了标记空间函数，除了要用(40.82)中各群的不可约表示的量子数$[\lambda]$、(ω)、L 、M_L 之外，还要引进附加量子数。

当 $l=3$ 时，$SU(7)$的生成元为 $\{\hat{u}_q^{(1)},\hat{u}_q^{(2)},\cdots,\hat{u}_q^{(6)}\}$，$SO(7)$的生成元为$\{\hat{u}_q^{(1)},\ \hat{u}_q^{(3)},\ \hat{u}_q^{(5)}\}$。考虑后者的一个子集$\{\hat{u}_q^{(1)},\hat{u}_q^{(5)}\}$，在这14个算子的对易关系中，由于耦合系数的三角条件，$[\hat{u}_q^{(1)},\ \hat{u}_{q'}^{(1)}]$中只可能出现$\hat{u}^{(1)}$，$[\hat{u}_q^{(1)},\hat{u}_{q'}^{(5)}]$中只可能出现$\hat{u}^{(5)}$，$[\hat{u}_q^{(5)},\ \hat{u}_{q'}^{(5)}]$中算子$\hat{u}^{(1)}$、$\hat{u}^{(3)}$、$\hat{u}^{(5)}$都可能出现。但由拉卡系数$U(5533;33)$偶然为零的性质又知，$\hat{u}^{(3)}$不可能在$[\hat{u}_q^{(5)},\ \hat{u}_{q'}^{(5)}]$中出现。由此可见，$\{\hat{u}_q^{(1)},\hat{u}_{q'}^{(5)}\}$在对易关系(40.71)下是封闭的，它们张成一个14维的子代数，这个子代数同构于例外李代数G_2. 因而在 $l=3$ 的特殊情况下，能够在$SO(7)$和$SO(3)$之间再插进一个群，这是一个14维的实李群，它的李代数（复扩充）为G_2. 通常也将此群记作G_2，于是我们有群链

$$SU(7)\supset SO(7)\supset G_2\supset SO(3)\supset SO(2) \qquad (40.83)$$

这五个实李群的维数依次为48、21、14、3、1；除了阿贝尔群$SO(2)$外都是单纯的，其秩依次为6、3、2、1.

按群链(40.83)分类的空间波函数，具有量子数$[\lambda]$、(ω)、(μ)、L 、M_L，其中(μ)为G_2的不可约表示的首权。但对整个f壳层$(l=3)$而言，(ω)和(μ)还不能完全取代量子数α（某些态除外），(μ)的作用是减少了附加量子数（对一部分

态不再需要附加量子数）。因此，即使引入了群 G_2，群链(40.83)也不能实现 f 壳层空间波函数的完全分类。

最后应指出，将状态按群链进行分类是具有重要的实用意义的。例如，在群链(40.83)中，群 $SO(3)$ 和 $SO(2)$ 都是体系的对称群，因而它们的不可约表示的量子数都是体系的好量子数。群 $SU(7)$ 并不是体系的对称群，但因它与电子的置换群的关系，它的不可约基也就是置换群的不可约基，并都可用量子数 $[\lambda]$ 标记。而置换群是体系的对称群，所以 $SU(7)$ 分类所提供的量子数 $[\lambda]$ 也是好量子数。对以上这些好量子数，体系的能量算子是对角化的，已如前述。群 $SO(7)$ 和 G_2 也不是体系的对称群，因而一般地，(ω) 和 (μ) 不是好量子数。那么，用 (ω) 和 (μ) 取代 α 有什么实际上的好处呢？以定态问题为例，这时要计算能量的矩阵元，特别是对 α 存在非对角元，它们对于 (ω)、(μ) 一般也是非对角的。我们如果能够将体系的相互作用能用关于群链(40.83)的不可约张量算子来表示，就可以利用维格纳—爱卡尔特定理来简化这些矩阵元的计算。此外还不难证明[4]，利用群链分类基也可以简化耦合系数的计算：关于母群的C——G系数可用关于子群的C——G系数与同母群有关的“同位标量因子”来表示。最后，由于在群链分类基中避免了或减少了不能用群论方法处理的附加量子数，在亲态比系数的计算上也将带来相应的简化。所以，尽管 (ω) 和 (μ) 不是好量子数，但由于上述原因，可以称它们为“较好的”量子数。从这个角度讲，将状态按包含体系的对称群在内的群链进行分类，其意义就在于将状态的量子数尽可能地取为“好的”或“较好的”。

40.6 原子的 jj 耦合分类基

在 jj 耦合方案中，各个电子的轨道——自旋相互作用被优先考虑。这时单电子的波函数应取为

$$\psi_{nljm_j}=R_{nl}(r)\sum_{m_s}\left(lm_j-m_s\frac{1}{2}m_s\middle|jm_j\right)$$

$$Y^l_{m_j-m_s}(\theta,\varphi)\cdot\omega_{m_s}(s_z)$$

而相应的单电子能级，是量子数(nlj)的函数。因而在略去电子之间的相互作用$\hat{H}'$时，电子体系的能量将取决于电子在各个单电子能级(nlj)中的分布数，即取决于电子体系的组态。为简单计，仍考虑所有f个电子都处于能级(nlj)中的一个特定的组态$(nlj)^f=j^f$（简记）。

组态j^f的非反称本征函数的完备系可写为

$$\left\{\psi_{m_1}(1)\psi_{m_2}(2)\cdots\psi_{m_f}(f):\ m_i=\pm\frac{1}{2},\ \pm\frac{3}{2},\cdots,\pm j\right\} \tag{40.84}$$

其中已将ψ_{nljm_j}中的固定下标n、l、j略去，并略去了m_j的下标j．显然(40.84)张成一个$(2j+1)^f$维的空间。这个空间在电子的置换群S_f下不变；在转动群$SO(3)$下，(40.84)按

$$\underbrace{D^{(j)}\otimes D^{(j)}\otimes\cdots\otimes D^{(j)}}_{f\text{个}} \tag{40.85}$$

变换。现在的问题是，如何将(40.84)同时按体系的对称群S_f和$SO(3)$约化，从而得出尽可能使$\hat{H}'$对角化的总反称的分类基。因为现在只涉及S_f的一维表示$[1^f]$，因而可以较为简便地作出这样的分类基（例如用亲态比方法）。

与LS耦合的情形一样，我们能够借助群论来处理附加量子数。为此，将(40.85)中的$D^{(j)}$扩充为$SU(2j+1)$的自然表示，于是(40.84)在群$SU(2j+1)$下将按表示

$$\underbrace{D^{[1]}\otimes D^{[1]}\otimes\cdots\otimes D^{[1]}}_{f\text{个}} \tag{40.86}$$

变换。将(40.84)按S_f约化和按$SU(2j+1)$约化是一致的，

特别的，总反称函数的完备集由 $D^{[1^f]}$的不可约基给出。为了进一步约化 $D^{[1^f]}$，并用"较好"的量子数来区分属于$SO(3)$的等价表示的不同函数，需要寻找介于$SU(2j+1)$和$D^{(j)}$之间的群。与前面讨论过的情形一样，$SU(2j+1)$的生成元为$\{\hat{u}_q^{(k)}$：$k=0,1,\cdots,2j$；$q=0,\pm1,\cdots,\pm k\}$，$D^{(j)}\cong SO(3)$的生成元为$\{\hat{u}_{-1}^{(1)},\hat{u}_0^{(1)},\hat{u}_1^{(1)}\}$，中间群的生成元为$\{\hat{u}_q^{(k)}$：$k=1,3,\cdots,2j\}$。现在需要找到这个中间群的同构类型。此处与$SU(2l+1)$的情况的基本差异是，$j$是半奇数，$2j+1$是偶数，而$l$是整数，$2l+1$是奇数。

考虑算子$\hat{u}_q^{(k)}$在基$\{\psi_{-j},\ \psi_{-j+1},\cdots,\psi_{-\frac{1}{2}},\ \psi_{\frac{1}{2}},\cdots,\psi_j\}$下的矩阵形式（由(40.51)定义，但将$l$换为$j$），这时(40.72)仍成立，但因不再有$(-1)^{2m}=1$，(40.75)和(40.76)不再成立。现重新定义一个基矢变换，它使基矢的次序倒转并乘以$(-1)^{m+\frac{1}{2}}$，即将$\psi_m=|jm\rangle$变为$(-1)^{m+\frac{1}{2}}\psi_{-m}=(-1)^{m+\frac{1}{2}}|j-m\rangle$。这个变换的矩阵显然为

$$Q=\left(\begin{array}{ccc|ccc} & & & & & \cdot^{\cdot^{\cdot}} \\ & & & & -1 & \\ & & & & 1 & \\ & & & -1 & & \\ \hline & & 1 & & & \\ & -1 & & & & \\ 1 & & & & & \\ \cdot^{\cdot^{\cdot}} & & & & & \end{array}\right) \tag{40.87}$$

$\hat{u}_q^{(k)}$在新基下的阵元为

$$\begin{aligned} &(-1)^{m+m'+1}(kqj-m\,|j-m')\\ &=(-1)^{m+m'+1}(-1)^k(k-qjm\,|jm')\\ &=-(-1)^{2m+1-q}(k-qjm\,|jm')\\ &=-(-1)^q(k-qjm\,|jm') \end{aligned}$$

注意：$k=$奇数，$(-1)^k=-1$；C—G系数的三角条件要

求 $m'=m-q$; $2m+1$ 是偶数，$(-1)^{2m+1}=1$; $(-1)^{-q}=(-1)^q$. 上式表明

$$Q^{-1}u_q^{(k)}Q=-(-1)^q u_q^{(k)}$$

对比(20.72)得出

$$\tilde{u}_q^{(k)}=-Q^{-1}u_q^{(k)}Q \qquad (k=\text{奇数}) \tag{40.88}$$

这个结果与(40.77)相似，但Q与S不同，Q是反对称的，因而不能写成(40.79)的形状。

不难看出，经矩阵

$$R_1=\begin{pmatrix}
\ddots & & & & & & & & \iddots \\
& 1 & & & 0 & & & 0 & \\
& & 0 & & & & 1 & & \\
& & & 1 & & 0 & & & \\
0 & & & & \begin{matrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{matrix} & & & & 0 \\
& & & 0 & & 1 & & & \\
& & 1 & & & & 0 & & \\
& 0 & & & 0 & & & 1 & \\
\iddots & & & & & & & & \ddots
\end{pmatrix} \tag{40.89}$$

的相似变换，Q被变为

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc}
 & & & & & 1 \\
 & & & & \iddots & \\
 & & & 1 & & \\
\hline
 & & -1 & & & \\
 & \iddots & & & & \\
-1 & & & & &
\end{array}\right)$$

这个矩阵再经矩阵

$$R_2=\left(\begin{array}{cccc:cccc} & & & & 1 & & & \\ & & & & & 1 & & \\ & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & 1 \\ \hdashline & & & 1 & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ 1 & & & & & & & \end{array}\right) \tag{40.90}$$

的相似变换，变为

$$\widetilde{K}=\left(\begin{array}{cccc:cccc} & & & & -1 & & & \\ & & & & & -1 & & \\ & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & -1 \\ \hdashline 1 & & & & & & & \\ & 1 & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & \\ & & & 1 & & & & \end{array}\right) \tag{40.91}$$

注意这些矩阵都是正交的

$$R_1^{-1}=\widetilde{R}_1,\quad R_2^{-1}=\widetilde{R}_2,\quad K^{-1}=\widetilde{K}$$

令

$$R=R_1R_2 \tag{40.92}$$

则有

$$\widetilde{R}QR=\widetilde{K}\quad 或\quad Q=R\widetilde{K}\widetilde{R}$$

代入(40.88)得

$$\widetilde{\widetilde{R}u_q^{(k)}R}=-K\widetilde{R}u_q^{(k)}R\widetilde{K}$$

令

$$w_q^{(k)}=\widetilde{R}u_q^{(k)}R=R^{-1}u_q^{(k)}R \tag{40.93}$$

则可写

$$\tilde{w}_q^{(k)} = -K w_q^{(k)} K^{-1} \qquad (k=\text{奇数}) \qquad (40.94)$$

上式表明，$\{w_q^{(k)}: k=1,3,\cdots,2j\}$张成的李代数由满足 $\tilde{A}=-KAK^{-1}$ 的矩阵构成。但 $w_q^{(k)}(k=\text{奇数})$的个数为 $\frac{2j+1}{2}\cdot(2j+2)=2\left(\frac{2j+1}{2}\right)^2+\frac{2j+1}{2}$，这正是所有满足$\tilde{A}=-KAK^{-1}$的矩阵$A$所构成的矩阵代数的维数。所以$\{w_q^{(k)}: k=1,3,\cdots,2j\}$是矩阵代数

$$\{A: \tilde{A}K+KA=0\}=sp(2j+1,C)$$

的基（将(40.90)、(40.94)与(26.46)、(26.47)对照）。又，(40.93) 表明，$\{u_q^{(k)}: k=1,3,\cdots,2j\}$ 张成的李代数与$\{w_q^{(k)}: k=1,3,\cdots,2j\}$ 张成的李代数是彼此同构的。从而知，$\{\hat{u}_q^{(k)}: k=1,3,\cdots,2j\}$张成的李代数的同构类型为

$$sp(2j+1,C)\cong C_{\frac{2j+1}{2}}$$

由于限制条件(40.53)，实际张成的李代数只是它的紧实形 $sp(2j+1)$，所生成的李群为幺正辛群（酉辛群） $S_p(2j+1)$。

$S_p(2j+1)$是一个$\left(j+\frac{1}{2}\right)(2j+2)$维的实李群，其秩为$\left(j+\frac{1}{2}\right)$($SU(2j+1)$的维数和秩分别为$[(2j+1)^2-1]$和$2j$)。这个群的不可约表示可用首权$(\sigma)=(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_{j+\frac{1}{2}})$来标记。于是我们有约化(40.84)或(40.86)的一个群链和标记分类基的好的或较好的量子数集

$$\begin{array}{ccccccc} SU(2j+1) & \supset & S_p(2j+1) & \supset & SO(3) & \supset & SO(2) \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ [1^f] & & (\sigma) & & J & & M_J \end{array} \qquad (40.95)$$

因为只有总反称的函数才具有物理意义，在分类基中我们只取$[\lambda]=[1^f]$的函数。这四组量子数的取值范围，每组都受限于

它的前一组，这是由相应的分支律确定的。

例如，对于 $j=\frac{7}{2}$ 壳层的组态 $\left(\frac{7}{4}\right)^4$，由相应的分支律可写出它的上述分类基的量子数的取值表

$[\lambda]$	(σ)	J
$[1^4]$	(0 0 0 0)	0
	(1 1 0 0)	2 4 6
	(1 1 1 1)	2 4 5 8

由它们标记的(40.95)分类基

$$\{\psi(j^4[1^4](\sigma)JM_J)\} \qquad (40.96)$$

形成了属于组态 $j^4\left(j=\frac{7}{2}\right)$ 的总反称波函数的完备集。在这个例子中，两个 $J=2$ 的多重态和两个 $J=4$ 的多重态都是用 (σ) 的不同值(1100)和(1111)来区分的，不再需要附加量子数。

40.7 高位数（先辈数）

为了简化原子的电子态的标记，其中的量子数 $(\omega)=(\omega_1,\omega_2,\cdots,\omega_l)$ 或 $(\sigma)=(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_{j+\frac{1}{2}})$ 可用一个非负整数 v 来取代，这个 v 常称为高位数或先辈数。

在 LS 耦合方案中，通过群链(40.82)引入的量子数是 $[\lambda]$（或 S）、(ω)、L、M. 对于电子态来说，$[\lambda]$ 局限于行数 $<(2l+1)$ 列数 <3 的图，且完全由 S 确定。由(40.23)可写

$$[\lambda]=[\underbrace{22\cdots2}_{\left(\frac{f}{2}-S\right)\text{个}}\quad\underbrace{11\cdots1}_{2S\text{个}}] \qquad (40.97)$$

按 $SU(2l+1)\rightarrow SO(2l+1)$ 分支律[7]，含于(40.97)中的 $SO(2l+1)$ 的不可约表示为

$$(\omega)=(\underbrace{22\cdots2}_{a\text{个}}\ \underbrace{11\cdots1}_{b\text{个}}\ \underbrace{00\cdots0}_{(l-a-b)\text{个}}) \tag{40.98}$$

$$a\leqslant\frac{f}{2}-S,\ b=\min\{2S,\ 2l+1-2S-2a\} \tag{40.99}$$

即满足(40.99)的(40.98)在(40.97)中各出现一次。利用这个规律，对已知组态 l^f，可由量子数S（或$[\lambda]$）的值写出所有(ω)的值。

以上结果表明，出现于已知$[\lambda]$中的(ω)可由一个非负整数a完全确定。显然，也可用另一个与a互相确定的数来标记(ω)。定义高位数

$$v=2(a+S) \tag{40.100}$$

由(40.99)对a的限制可知，对给定的f、$S([\lambda])$，v的取值范围是

$$v=2S,\ 2S+2,\cdots,\ f \tag{40.101}$$

(ω)通过下式由v决定

$$\begin{cases}a=\dfrac{v}{2}-S\\ b=\min(2S,\ 2l+1-v)\end{cases} \tag{40.102}$$

所以，量子数集$\{[\lambda](S)、(\omega)、L\}$可由$\{l,\ f,\ v,\ S,\ L\}$取代，由组态$l^f$产生的谱项可用高位数$v$作进一步区分，记作

$$l^f v^{2S+1}L \tag{40.103}$$

从f壳层开始，需引入附加量子数，这时可用附加量子数对谱项作更细地区分。

在jj耦合方案中，通过群链(40.95)引进的量子数为$[1^f]$、(σ)、J、J_M，因$[1^f]$只有一列，这时的情形要简单得多。有$SU(2j+1)\to S_p(2j+1)$的分支律

$$[\underbrace{11\cdots1}_{f\text{个}}]=(\underbrace{11\cdots1}_{g\text{个}}0\cdots0)\oplus(\underbrace{11\cdots1}_{(g-2)\text{个}}0\cdots0)\oplus\cdots \tag{40.104}$$

$$g=\min\{f,\ 2j+1-f\} \tag{40.105}$$

定义高位数

$$v=\sum_i \sigma_i \tag{40.106}$$

v 的取值范围由(40.104)和(40.105)给定：

$$v=g,\ g-2,\ g-4,\cdots,1 \text{ 或 } 0 \tag{40.107}$$

而出现于$[1^f]$中的(σ)则完全由高位数 v 确定。所以，量子数集$\{[1^f],\ (\sigma),\ J\}$可由$\{j,\ f,\ v,\ J\}$取代，而由组态 j^f 生成的多重态可记为

$$j^f v^J \tag{40.108}$$

第八章　空间群的表示

空间群是晶格点阵的对称群，它给出了相应的晶格点阵的几何（空间）对称性的完全的刻画。这种对称性也就是晶体中的电子体系所处的晶格场的对称性，同时也是晶格内部相互作用的对称性。因此，晶体中的电子状态以及晶格的振动状态都可以按相应的空间群的不可约表示进行分类，而空间群的不可约表示的标记将给出晶体中的电子能带和声子色散曲线的标记。这与分子的情况是类似的。但由于晶格结构的复杂性，群论方法对于固体理论来说具有更为重要的意义。

本章将介绍空间群的表示论及其对晶体中的电子结构问题的应用。希望读者可以由此掌握固体物理中的群论方法。

§41　格羣的不可约表示

41.1　格群的不可约表示

在§3中已经知道，格群是空间群的纯平移子群，它描述了晶格点阵的平移对称性。由9.4节的例4又知，格群是空间群的一个不变子群。为了建立空间群的不可约表示，我们从它的这个不变子群——格群开始。

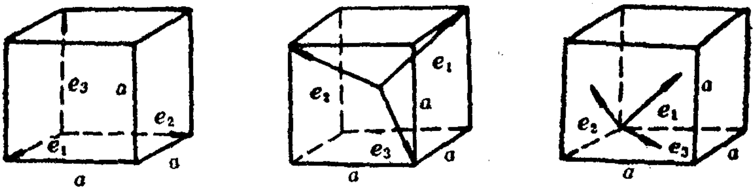
在§3中推知，格群只有14种可能的类型。将一个格群的所有元（平移）作用于空间的任意点（原点），则生成一个三维的无穷点阵，这就是布喇菲点阵（格子）。所以布喇菲点阵一般并不是实际的晶体点阵，而只是晶体点阵的平移对称性即格群的一种几何图象。与14种格群相应的几何图象，便是14种

布喇菲点阵。

格群的元$(\varepsilon|\boldsymbol{n})$代表一个平移操作，其平移矢量为格矢

$$\boldsymbol{n}=n_1\boldsymbol{e}_1+n_2\boldsymbol{e}_2+n_3\boldsymbol{e}_3 \qquad ((3.1))$$

其中n_i为整数，$\{\boldsymbol{e}_1,\ \boldsymbol{e}_2,\ \boldsymbol{e}_3\}$为格矢的基。对于不同的格群，格矢的基不同。例如，属于立方晶系的三种不同格群，其格矢的基与基本平行六面体单位的关系如图 41.1 所示。



立方P型　　立方I型　　立方F型

图 41.1　立方点阵的基本六面体与格矢的基

如用相对于基本平行六面体的棱矢的坐标写出，则有

$$\text{立方}P\text{型}\begin{cases}\boldsymbol{e}_1=(a,\ 0,\ 0)\\ \boldsymbol{e}_2=(0,\ a,\ 0)\\ \boldsymbol{e}_3=(0,\ 0,\ a)\end{cases};\quad \text{立方}I\text{型}\quad \begin{aligned}\boldsymbol{e}_1&=\frac{1}{2}(-a,\ a,\ a)\\ \boldsymbol{e}_2&=\frac{1}{2}(a,\ -a,\ a);\\ \boldsymbol{e}_3&=\frac{1}{2}(a,\ a,\ -a)\end{aligned}$$

$$\text{立方}F\text{型}\quad \begin{aligned}\boldsymbol{e}_1&=\frac{1}{2}(0,\ a,\ a)\\ \boldsymbol{e}_2&=\frac{1}{2}(a,\ 0,\ a)\\ \boldsymbol{e}_3&=\frac{1}{2}(a,\ a,\ 0)\end{aligned}$$

以基$\{e_i\}$为棱矢的平行六面体给出格群的布喇菲点阵的最小单元——元胞。

格矢的基$\{e_i\}$也可以用与坐标无关的形式给出，即给出其长度和夹角。为此，引入度规张量

$$g_{ij}=e_i\cdot e_j,\quad i,j=1,2,3 \tag{41.1}$$

对于不同类型的格群，有不同的度规张量。例如，与立方P、I、F型点阵相应的三种格群，其度规张量的矩阵分别为

$$g_P=\begin{pmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{pmatrix},\quad g_I=\begin{pmatrix} \frac{3}{4}a^2 & -\frac{1}{4}a^2 & -\frac{1}{4}a^2 \\ -\frac{1}{4}a^2 & \frac{3}{4}a^2 & -\frac{1}{4}a^2 \\ -\frac{1}{4}a^2 & -\frac{1}{4}a^2 & \frac{3}{4}a^2 \end{pmatrix},$$

$$g_F=\begin{matrix} \frac{1}{2}a^2 & \frac{1}{4}a^2 & \frac{1}{4}a^2 \\ \frac{1}{4}a^2 & \frac{1}{2}a^2 & \frac{1}{4}a^2 \\ \frac{1}{4}a^2 & \frac{1}{4}a^2 & \frac{1}{2}a^2 \end{matrix}$$

注意到基矢的绝对长度是无关紧要的，可从度规张量中去掉一个常数因子。从而又可写

$$g_P=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$g_I=\begin{pmatrix}1 & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3}\\ -\frac{1}{3} & 1 & -\frac{1}{3}\\ -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 1\end{pmatrix},\quad g_F=\begin{pmatrix}1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1\end{pmatrix}\qquad(41.2)$$

上式表明，在每一种情形下基矢都是等长和等夹角的，三种情形的差别在于基矢的夹角之余弦值分别为 $\cos\theta=0,\ -\frac{1}{3},\ \frac{1}{2}$.

格群

$$H=\{(\varepsilon|\boldsymbol{n})\}\qquad(41.3)$$

都是分立无限群。为了用有限群论的方法来处理格群，通常采用如下办法来将格群"有限化"。在量子力学中，为了对固体中的电子态计数（使状态分立化），通常使用周期性边界条件

$$\begin{cases}\psi(\boldsymbol{r}+N\boldsymbol{e}_1)=\psi(\boldsymbol{r})\\ \psi(\boldsymbol{r}+N\boldsymbol{e}_2)=\psi(\boldsymbol{r})\\ \psi(\boldsymbol{r}+N\boldsymbol{e}_3)=\psi(\boldsymbol{r})\end{cases}\qquad N\gg1\qquad(41.4)$$

当 $N\to\infty$，分立谱将过渡到连续谱。如果将 $(\varepsilon|\boldsymbol{n})$ 同时看作是作用于满足周期性条件的函数类上的平移算子，则(41.4)表明有算子的等式：

$$(\varepsilon|e_1)^N=(\varepsilon|e_2)^N=(\varepsilon|e_3)^N=(\varepsilon|0)\qquad(41.5)$$

现在将(41.5)作为对格群 H 本身的一个限制条件，则 H 成为一个 N^3 阶的有限群。事实上，由于(41.5)，H 可以写成三个 N 阶循环群的直积

$$H=\{(\varepsilon|e_1)^{n_1}\}\times\{(\varepsilon|e_2)^{n_2}\}\times\{(\varepsilon|e_3)^{n_3}\}\qquad(41.6)$$

其中 $n_1,n_2,n_3=0,1,2,\cdots,N-1$.

由 5.1 和 5.2 节的结果知，H 共有 N^3 个不可约表示，都

是1维的

$$\begin{cases}A^{(m_1,m_2,m_3)}((\varepsilon|\boldsymbol{n}))=e^{2\pi i(m_1n_1+m_2n_2+m_3n_3)/N}\\ m_1,m_2,m_3=0,1,2,\cdots,N-1\end{cases} \tag{41.7}$$

41.2 波矢空间

为了更方便地标记格群的不可约表示，并使这种标记几何化，我们引入波矢和波矢空间。首先引入基$\{\boldsymbol{e}_i\}$的对偶基$\{\tilde{\boldsymbol{e}}_i\}$，其定义如下

$$\begin{cases}\tilde{\boldsymbol{e}}_1=2\pi\boldsymbol{e}_2\times\boldsymbol{e}_3/D\\ \tilde{\boldsymbol{e}}_2=2\pi\boldsymbol{e}_3\times\boldsymbol{e}_1/D\\ \tilde{\boldsymbol{e}}_3=2\pi\boldsymbol{e}_1\times\boldsymbol{e}_2/D\end{cases} \tag{41.8}$$

$$D=\boldsymbol{e}_1\cdot\boldsymbol{e}_2\times\boldsymbol{e}_3 \tag{41.9}$$

易验证，有正交关系

$$\tilde{\boldsymbol{e}}_i\cdot\boldsymbol{e}_j=2\pi\delta_{ij} \tag{41.10}$$

定义矢量

$$\boldsymbol{k}=\frac{m_1}{N}\tilde{\boldsymbol{e}}_1+\frac{m_2}{N}\tilde{\boldsymbol{e}}_2+\frac{m_3}{N}\tilde{\boldsymbol{e}}_3 \tag{41.11}$$

则可用$\boldsymbol{k}$来标记群H的不可约表示。利用(41.10)可将(41.7)写为

$$\begin{cases}A^{(\boldsymbol{k})}((\varepsilon|\boldsymbol{n}))=e^{i\cdot\boldsymbol{kn}}\\ 0\leqslant k_i=\dfrac{m_i}{N}<1\end{cases} \tag{41.12}$$

对确定的N，$\boldsymbol{k}$有N^3个值，给出H的全部N^3个不可约表示。当$N\to\infty$时，$\frac{1}{N}\to 0$，故$\boldsymbol{k}$可认为是连续变化的，其变化范围为$k_i\in[0,1)$。

常将对偶基$\{\tilde{\boldsymbol{e}}_i\}$所张成的三维空间称为波矢空间，而将这个空间中的矢量$\boldsymbol{k}$称为波矢。(41.2)表明，H的不可约表示

是与波矢空间一个元胞上的点（波矢）一一对应的，这个元胞可取为以$\{{}_1\tilde{\boldsymbol{e}},\ \tilde{\boldsymbol{e}}_2,\ \tilde{\boldsymbol{e}}_3\}$为棱矢的平行六面体

$$0\leqslant k_i<1 \qquad (i=1,2,3) \qquad (41.13)$$

如果去掉一一对应的限制，则波矢空间中的每一波矢$\boldsymbol{k}$都确定H的一个不可表示$A^{(k)}=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}$。这时由于$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}=2\pi(k_1n_1+k_2n_2+k_3n_2)$，两个波矢$\boldsymbol{k}$和$\boldsymbol{k}'$确定同一个表示的充要条件为

$$\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{m} \qquad (41.14)$$

$$\boldsymbol{m}=m_1\tilde{\boldsymbol{e}}_1+m_2\tilde{\boldsymbol{e}}_2+m_3\tilde{\boldsymbol{e}}_3 \qquad (41.15)$$

波矢$\boldsymbol{m}$（m_i为整数）称为倒格矢。

相差一个倒格矢的两个格矢称为是彼此等价的。波矢空间中所有彼此等价的格矢确定H的同一个不可约表示，不等价的波矢确定不同的不可约表示。

倒格矢的集合在波矢空间中生成一个三维无穷点阵，称为H的布喇菲点阵(由格矢$\boldsymbol{n}$的集合生成)的逆点阵或对偶点阵。显然，任一个等价波矢的集合都生成一个逆点阵，不同的等价集合生成的逆点阵是相互平行的（对同一个H）。

逆点阵的类型同样可用倒格矢的度规张量来刻画，其定义为

$$g'_{ij}=\tilde{\boldsymbol{e}}_i\cdot\tilde{\boldsymbol{e}}_j,\quad i,j=1,2,3 \qquad (41.16)$$

不难看出，$\frac{1}{2\pi}(g'_{ij})$是由基$\{e_i\}$到对偶基$\{\tilde{\boldsymbol{e}}_i\}$的变换矩阵。令

$$\tilde{\boldsymbol{e}}_j=\sum_l S_{lj}e_l$$

两边与$\tilde{\boldsymbol{e}}_i$作内积，并利用正交关系(41.10)，便得出

$$g'_{ij}=2\pi S_{ij}$$

于是有

$$\tilde{\boldsymbol{e}}_i=\frac{1}{2\pi}\sum_j g'_{ji}\boldsymbol{e}_j \qquad (41.17)$$

同理有

$$e_i=\frac{1}{2\pi}\sum_j g_{ij}\tilde{e}_i \tag{41.18}$$

即$\frac{1}{2\pi}(g_{ij})$是由$\{\tilde{e}_i\}$变到$\{e_i\}$的变换矩阵。所以矩阵$\frac{1}{2\pi}g'$和$\frac{1}{2\pi}g$是互逆的

$$g'=4\pi^2 g^{-1} \tag{41.19}$$

可见，互逆点阵的度规张量（除以2π）也是互逆的。前面已经指出，在度规张量中改变一个常数因子，相当于改变基矢的绝对长度（差一比例常数），这只使点阵作相似变化，所以是无关紧要的。因而两个点阵的互逆条件(41.19)可以放宽，写为

$$g'=ag^{-1} \tag{41.20}$$

如果$G_0=\{\alpha\}$是点阵$\{\boldsymbol{n}\}$的对称点群，即$\{\boldsymbol{n}\}$在G_0下不变，则有

$$\alpha^{-1}\boldsymbol{n}=n_1'\boldsymbol{e}_1+n_2'\boldsymbol{e}_2+n_3'\boldsymbol{e}_3$$

从而有

$$\alpha\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{n}=\boldsymbol{m}\cdot\alpha^{-1}\boldsymbol{n}=2\pi(m_1n_1'+m_2n_2'+m_3n_3')=2\pi\times\text{整数}$$

假如$\alpha\boldsymbol{m}$在基$\{\tilde{\boldsymbol{e}}_i\}$下的展式为

$$\alpha\boldsymbol{m}=x_1\tilde{\boldsymbol{e}}_1+x_2\tilde{\boldsymbol{e}}_2+x_3\tilde{\boldsymbol{e}}_3$$

可写（注意(41.10)）

$$\alpha\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{n}=2\pi(x_1n_1+x_2n_2+x_3n_3)$$

于是有

$$x_1n_1+x_2n_2+x_3n_3=\text{整数}$$

上式对任何整数n_1、n_2、n_3都成立。由此推知，x_1、x_2、x_3都是整数，所以$\alpha\boldsymbol{m}$仍为一倒格矢。这就证明了，$\{\boldsymbol{n}\}$的逆点阵$\{\boldsymbol{m}\}$在G_0下也不变，即G_0也是点阵$\{\boldsymbol{m}\}$的对称点群。所以，

互逆的点阵具有相同的对称点群。由此可知，互逆的点阵必属于同一晶系。当然，它们可以属于不同的类型。

例如，对立方晶系的三种类型的点阵，由(41.2)可得

$$g_P = g_P^{-1} \qquad (41.21)$$

$$g_I = \frac{2}{3} g_F^{-1} \qquad (41.22)$$

从而可见，立方P点阵是自逆的，而立方I点阵与立方F点阵是互逆的。

41.3 布里渊(Brillouin) 区

前面提到，以基$\{\tilde{e}_1, \tilde{e}_2, \tilde{e}_3\}$为棱矢的平行六面体形成波矢空间的一个元胞。显然，若将这个元胞做由所有倒格矢所确定的一切可能的平移，它恰好无重叠地填满整个$\boldsymbol{k}$空间。$\boldsymbol{k}$空间中任何一个满足上述条件的有限区域，都称为这个空间的元胞。由此定义容易看出，用$\boldsymbol{k}$空间中任意一个元胞上的波矢都可以确定格群H的所有不可约表示。因此要对元胞加以讨论。

上述的平行六面体元胞非常简单，这是它的优点；但它在格子的对称点群下一般不是不变的，因而不能自动地显示出格子的点对称性。可以作出一种对称元胞，它在格子的点群下不变；从而既能表现格子的平移对称性又能表现格子的点对称性。$\boldsymbol{k}$空间中这样的对称元胞称为（第一）布里渊区。

在$\boldsymbol{k}$空间中任取一格点，作此格点到所有近邻格点的连线，再作这些连线的垂直平分面，这些平面围出一个区域。这个区域便是一个以所取格点为中心的布里渊区。显然，这个区域是那些到所取格点的距离小于到其他格点的距离的点的集合。首先，这样的区域是一个元胞，这是因为围绕每个格点都有一个这样的区域，而它们互不重叠且组成整个$\boldsymbol{k}$空间。其次，这个元胞还在点阵的对称点群下不变，这是因为，使点阵

不变的点操作（以所取格点为不动点）也使上述那些垂直平分面的集合不变，即使元胞的边界面不变。通常将布里渊区取为以原点($\boldsymbol{k}=0$)为中心的对称元胞，并将元胞的表面包括在内。显然，布里渊区内部的所有点（波矢）都是彼此不等价的，但面上的点可能有等价关系。

为了描绘布里渊区的点（波矢）的对称性，可引入波矢的点群的概念。设 G_0 为晶体的点群，则如上述，布里渊区在G_0下不变。令 $\boldsymbol{k}$ 为布里渊区的任一波矢，G_0 中使 $\boldsymbol{k}$ 不变或变成其等价点的操作之集合显然成群，我们将这个群称为波矢 $\boldsymbol{k}$ 的点群，记作 $G_0(\boldsymbol{k})$

$$G_0(\boldsymbol{k})=\{\alpha:\ \alpha\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{m},\ \alpha\in G_0\} \qquad (41.23)$$

$G_0(\boldsymbol{k})$也是晶体点群，且 $G_0(\boldsymbol{k})\subset G_0$.

G_0 中的两个操作 α 和 β 将 $\boldsymbol{k}$ 变为等价点的充要条件是

$$\begin{aligned}\alpha\boldsymbol{k}=\beta\boldsymbol{k}+\boldsymbol{m}&\Longleftrightarrow\beta^{-1}\alpha\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\beta^{-1}\boldsymbol{m}\\&=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{m}'\Longleftrightarrow\beta^{-1}\alpha\in G_0(\boldsymbol{k})\Longleftrightarrow\alpha\in\beta G_0(\boldsymbol{k})\end{aligned}$$

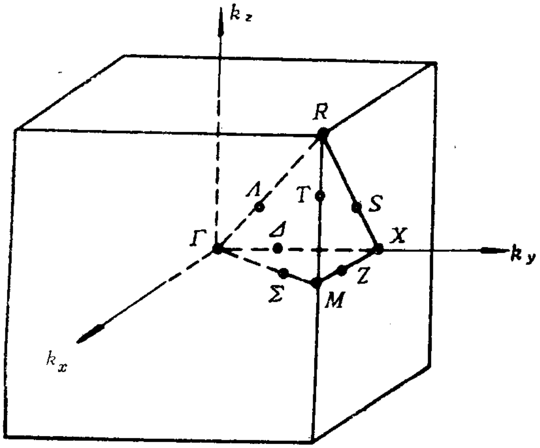
即 α 和 β 属于 G_0 关于 $G_0(\boldsymbol{k})$的同一个左陪集。由此可见，由 G_0 的操作作用于 $\boldsymbol{k}$ 所能产生出的不等价的波矢的数目，等于 G_0 的阶与 $G_0(\boldsymbol{k})$的阶之比，即 G_0 关于 $G_0(\boldsymbol{k})$的陪集数。如在各个陪集中取代表元 α_1，$\alpha_2,\cdots,\alpha_q$，则 $\boldsymbol{k}$ 在 G_0 下产生的一个不等价的波矢集可写为

$$\{\alpha_1\boldsymbol{k},\ \alpha_2\boldsymbol{k},\cdots,\alpha_q\boldsymbol{k}\} \qquad (41.24)$$

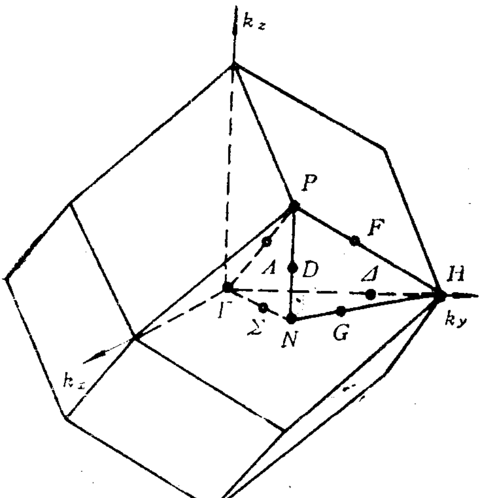
对于立方晶系，与三种布喇菲点阵相应的格群的布里渊区如图 41.2 所示。图中同时标出了一些在 G_0 下具有特殊对称性的代表点。立方晶系的 $G_0=O_h$，是 48 阶的。容易看出，若 $\boldsymbol{k}$ 的点群为 $G_0(\boldsymbol{k})$，则 $\alpha\boldsymbol{k}(\alpha\in G_0)$的点群为 $\alpha G_0(\boldsymbol{k})\alpha^{-1}$. 而 G_0 的这两个共轭子群显然是彼此同构的，即有

$$\alpha G_0(\boldsymbol{k})\alpha^{-1}\cong G_0(\boldsymbol{k}),\ \alpha\in G_0$$

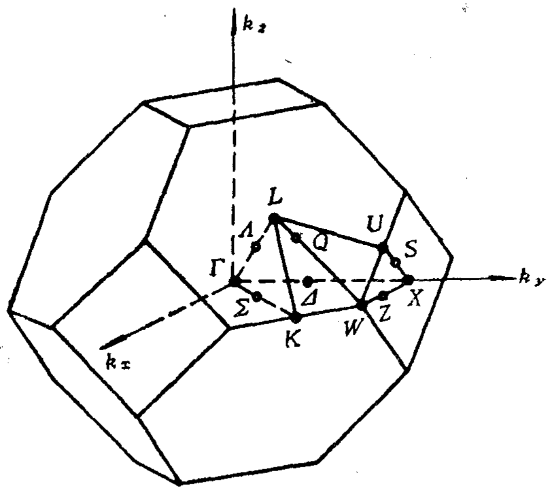
所以，在同构的意义下可以说，布里渊区中所有可以通过 G_0



(a) 简单立方



(b)体心立方



(c) 面心立方

图 41.2 立方点阵的布里渊区

的操作相互变换的波矢，其点群是相同的。或写

$$G_0(\alpha \boldsymbol{k}) \cong G_0(\boldsymbol{k}), \quad \alpha \in G_0 \tag{41.25}$$

因此，为了考察整个布里渊区的波矢点群，只需考虑它的一个子区域，这个子区域在 G_0 所有操作的作用下将无重叠地填满整个布里渊区，可称为布里渊区的一个基本区。基本区的选取显然不是唯一的，但整个布里渊区总是由 $N(G_0)$（G_0 的阶）个全等的基本区组成。在上面画出的三种布里渊区中，已同时画出了各自的一个基本区，整个布里渊区由 48 个全等的基本区组成。我们只需考虑一个基本区上的点。

下面以简单立方点阵的情形为例，写出基本区上各点的波矢点群。

一般点

这是指基本区内部的点，这些点上的波矢只在 G_0 的恒等操作下不变，而且在整个布里渊区上没有与之等价的点。所以，这些波矢的点群为

$$G_0(\boldsymbol{k})=\{I\}=C_1 \tag{41.26}$$

对称面上的一般点

基本区的三个面 ΓMX、ΓXR、ΓRM，是 $G_0=O_h$ 的对称元素系中的三个对称面，在这三个三角形各自内部的点统称为对称面上的一般点。这些点上的波矢只在 G_0 的恒等操作以及关于所处对称面的反映操作下不变，而且在整个布里渊区上没有与之等价的点。所以这些波矢的点群为

$$G_0(\boldsymbol{k})=\{I,\ \sigma\}=C_s \tag{41.27}$$

表面上的一般点

三角形 MXR 属于布里渊区的表面，这个三角形内部的点称为表面上的一般点。这些点上的波矢只在 G_0 的恒等操作下不变，但每个波矢在布里渊的相对表面上有一个等价波矢，而等价波矢通过反映 σ 互换。所以表面上的一般点的波矢点群为

$$G_0(\boldsymbol{k})=\{I,\ \sigma\}=C_s \tag{41.28}$$

Δ 点

线段 ΓX 属于 G_0 的一个 4 次轴，Δ 是此线段内部的一般点，显然有

$$G_0(\Delta)=C_{4v} \tag{41.29}$$

Λ 点

线段 ΓR 属于 G_0 的一个 3 次轴，Λ 是此线段内部的一般点，有

$$G_0(\Lambda)=C_{3v} \tag{41.30}$$

Σ 点

线段 ΓM 属于 G_0 的一个 2 次轴，Σ 是此线段内部的一般点，有

$$G_0(\Sigma)=C_{2v} \tag{41.31}$$

Γ 点

Γ 是 G_0 的对称中心，在 G_0 下不动，有

$$G_0(\Gamma)=G_0=O_h \tag{41.32}$$

X 点

X 除了在群 $G_0(\Delta)=C_{4v}$ 下不动外，还有一个处于布里渊区相对表面中心的等价点，因而波矢点群中还含有一个垂直于 ΓX 的 2 次轴(k_z)，所以

$$G_0(X)=D_{4h} \tag{41.33}$$

R 点

R 点在布里渊区上的等价点是其余七个顶点，可见使布里渊区不变的任何操作，或使 R 不动，或将 R 变为其等价点。于是有

$$G_0(R)=O_h \tag{41.34}$$

M 点

M 除了在 $G_0(\Sigma)=C_{2v}$ 下不动外，还有三个处于布里渊区平行棱中点的等价点，因而 $G_0(M)$ 中还含有一个垂直于 ΓM 的 4 次轴(k_z)，所以

$$G_0(M)=D_{4h} \tag{41.35}$$

Z 点

Z 是线段 MX 内部的一般点，它有一个处于布里渊区对面上的等价点，两者可通过绕 k_x 轴转 π 的操作互换，因而 k_x 轴是 $G_0(Z)$ 的一个 2 次轴。又 Z 在 G_0 的映面 k_xk_y 上，因而 $G_0(Z)$ 也含此映面。可知

$$G_0(Z)=C_{2v} \tag{41.36}$$

S 点

S 是线段 XR 内部的一般点，它在 G_0 的一个映面(ΓXR)上，故 $G_0(S)$ 含此映面。又，S 有一个等价点处于布里渊区的

对面上，两者通过G_0的一个映面k_xk_z互换，故k_xk_z也是$G_0(S)$的一个映面。注意以上两个映面互相垂直，可见有

$$G_0(S)=C_{2v} \tag{41.37}$$

T点

T是线段RM内部的一般点，它在G_0的一个映面(ΓRM)上，故$G_0(T)$含此映面。又，T有三个等价点分别处于布里渊区平行于RM的三个棱上，这四个点可以通过绕G_0的4次轴k_z的转动互换，故$G_0(T)$也含此4次轴。上述的4次轴含于所说的映面中，由此得知

$$G_0(T)=C_{4v} \tag{41.38}$$

§42 诱导表示

42.1 诱导表示的概念

上节中我们已很容易地作出了任意格群的不可约表示的完全集。由于每个空间群都以一个格群为子群，因而如能找到一种由子群的已知表示诱导出母群的一个表示的方法，将有助于建立空间群的不可约表。显然，这个问题不只对空间群的表示论有意义，对于群表示的一般理论也有同样的意义。下面将会看到，由空间群的一些子群的不可约表示诱导出的空间群的表示也是不可约的，而且可以这样产生出空间群的全部不可约表示。因此，将诱导表示这一普遍概念放在本章来讨论是适当的。

其实诱导表示的概念，我们在上一章已经用到，只是没有使用这个普遍的词。这就是在§38中讨论过的置换群的表示的外积：由子群$S_{n_1}\times S'_{n_2}$的已知表示诱导出的母群$S_{n_1+n_2}$的表示。(38.8)表明，外积表示(诱导表示)的基可由$S_{n_1+n_2}$关于子群$S_{n_1}\times S'_{n_2}$的各个左陪集的代表元（算子）作用于子群的表示的基来生成。将这一点一般化，便可得出诱导表示的概念。

设G为任意有限群，M为G的一个子群，

$$G=g_1M\cup g_2M\cup\cdots\cup g_qM \tag{42.1}$$

是G对M的左陪集分解，$g_1, g_2, \cdots, g_q$是各陪集的代表元($q=N(G)/N(M)$)。令

$$\{u_1, u_2, \cdots, u_{n_i}\} \tag{42.2}$$

为M的第i个不可约表示的基，这个表示的矩阵和特征标分别为$A^{(i)}$和$\mu^{(i)}$. 则有

$$\hat{m}u_k=\sum_{k'=1}^{n_i}A^{(i)}_{k',k}(m)u_{k'}\ , m\in M \tag{42.3}$$

将各左陪集的代表元的算子作用于(42.2)，得出q个矢量组($g_1=e$, $\hat{g}_1=1$)

$$\begin{cases}\{\hat{g}_1u_1, & \hat{g}_1u_2, \cdots, \hat{g}_1u_{n_i}\}\\ \{\hat{g}_2u_1, & \hat{g}_2u_2, \cdots, \hat{g}_2u_{n_i}\}\\ & \cdots\cdots\\ \{\hat{g}_qu_1, & \hat{g}_qu_2, \cdots, \hat{g}_qu_{n_i}\}\end{cases} \tag{42.4}$$

因对于M之外的群元g_l，$\hat{g}_l$对u_k的作用尚未定义，我们可以将$\hat{g}_lu_k$定义为一个以(42.2)为子空间的更大的线性空间中的矢量，并规定这q个组之间是线性无关的；另，若

$$gg_l=g_jm,\ g\in G,\ m\in M \tag{42.5}$$

则线性算子$\hat{g}$对矢量$\hat{g}_lu_k$的作用定义为

$$\hat{g}(\hat{g}_lu_k)=\hat{g}_j\hat{m}u_k \tag{42.6}$$

因为$\hat{m}u_k$为(42.2)的已知组合，而$\hat{g}_j$是线性的，可作用到组合的每个基矢$u_{k'}$上，$\hat{g}_j$对$u_{k'}$的作用则由(42.4)确定，所以(42.6)的右边是有明确意义的。

容易证明：(42.4)张成的空间在G下不变，其每个组中的矢量也是无关的，因而由(42.4)和(42.6)定义了群G的一个$q\times n_i$维表示。这个表示称为子群M的表示$A^{(i)}$的诱导表示，

(42.4)是诱导表示的基。

(42.4)张成的空间在G下的不变性可直接证明如下：将(42.3)代入(42.6)，有

$$\hat{g}(\hat{g}_l u_k)=\sum_{k'=1}^{n_i} A^{(i)}_{k'k}(m)(\hat{g}_j u_{k'})$$

$$=\sum_{l'k'}\delta_{l'j}A^{(i)}_{k'k}(m)(\hat{g}_{l'}u_{k'}) \qquad (42.7)$$

以算子 $\hat{g}_l\hat{m}\hat{g}_l^{-1}$ 作用于 $\hat{g}_l u_k$，得

$$(\hat{g}_l\hat{m}\hat{g}_l^{-1})(\hat{g}_l u_k)=\sum_{k'=1}^{n_i} A^{(i)}_{k'k}(m)(\hat{g}_l u_k) \qquad (42.8)$$

这表明，$\{\hat{g}_l u_1, \hat{g}_l u_2, \cdots, \hat{g}_l u_k\}$按$M$的共轭子群$\hat{g}_l M\hat{g}_l^{-1}$的不可约表示$A^{(i)}$（特征标为$\mu^{(i)}$）变换。因而这组矢量线性无关。

42.2 诱导表示的矩阵和特征标

我们看到，由子群M的不可约表示$A^{(i)}$诱导出的群G的表示是$\dfrac{N(G)}{N(M)}\times n_i$维的，它在基(42.4)下的矩阵$B(g)$由(42.7)确定。可写为

$$\begin{cases} B_{l'k',lk}(g)=\delta_{l'j}A^{(i)}_{k'k}(m) \\ gg_l=g_jm,\quad g\in G,\quad m\in M \end{cases} \qquad (42.9)$$

也可将矩阵B写成按指标l和l'分块的形式，在这个分块矩阵的每个列中，只有一个子块不为零。$B(g)$第l列上的唯一非零子块在第j行上，且等于$A^{(i)}(m)$，即有

$$B_{l'l}(g)=\delta_{l'j}A^{(i)}(m) \qquad (42.10)$$

其中的j和m由(42.5)确定。

由(42.10)，诱导表示的特征标可写为

$$\chi_i(g)=\sum_{l=1}^{q}\delta_{lj}\mu^{(i)}(m)=\sum_m{}'\mu^{(i)}(m) \qquad (42.11)$$

对给定的g和l，j和m由(42.5)确定故都是g和l的函数。由

于和号下的 δ_{lj} 因子，求和可只对 $j=l$ 进行，即对

$$gg_l=g_lm \quad 或 \quad g=g_lmg_l^{-1} \tag{42.12}$$

的 l 进行。当然，对 l 的求和也可写成对 m 的求和，(42.11) 中的 $\sum\limits_m{}'$ 表示对满足

$$m=g_l^{-1}gg_l\in M \tag{42.13}$$

的 m 求和，g_l 是 G 对于 M 的左陪集的代表元。显然，也可将 $\sum\limits_m{}'$ 写为 $\sum\limits_{\substack{l \\ (g_l^{-1}gg_l\in M)}}$，于是有

$$\chi_i(g)=\sum_{\substack{l \\ (g_l^{-1}gg_l\in M)}}\mu^{(i)}(g_l^{-1}gg_l) \tag{42.14}$$

注意到在 $\mu^{(i)}(g_l^{-1}gg_l)$ 中用 $g_lm(m\in M)$ 代替 g_l 时，$\mu^{(i)}$ 的值不变，可写

$$\mu^{(i)}(g_l^{-1}gg_l)=\frac{1}{N(M)}\sum_{s\in g_lM}\mu^{(i)}(s^{-1}gs)$$

代入(42.14)，并注意

$$g_l^{-1}gg_l\in M\Longleftrightarrow(g_lm)^{-1}g(g_lm)\in M$$

又得

$$\chi_i(g)=\frac{1}{N(M)}\sum_{\substack{s\in G \\ (s^{-1}gs\in M)}}\mu^{(i)}(s^{-1}gs) \tag{42.15}$$

如用 K_g 代表 g 在 G 中的共轭类，上式可写为

$$\chi_i(g)=\frac{1}{N(M)}\sum_{s\in M\cap K_g}\mu^{(i)}(s) \tag{42.16}$$

设 $\chi_i(g)$ 对群 G 的单纯特征标的分解式为

$$\chi_i(g)=\sum_k a_{ki}\chi^{(k)}(g),\quad g\in G \tag{42.17}$$

则有

$$a_{ki}=\frac{1}{N(G)}\sum_{g}\chi_i(g)\chi^{(k)}(g^{-1})$$

$$=\frac{1}{N(G)}\sum_{l\,g}\delta_{ij}\mu^{(i)}(m)\chi^{(k)}(g^{-1})$$

$$=\frac{1}{N(G)}\sum_{l}\sum_{m\in M}\mu^{(i)}(m)\chi^{(k)}(g_l m^{-1} g_l^{-1})$$

$$=\frac{1}{N(G)}\sum_{l=1}^{q}\sum_{m\in M}\mu^{(i)}(m)\chi^{(k)}(m^{-1})$$

$$=\frac{q}{N(G)}\sum_{m\in M}\chi^{(k)}(m)\mu^{(i)}(m^{-1})$$

注意到$N(G)=q\times N(M)$，上式可写为

$$a_{ki}=\frac{1}{N(M)}\sum_{m\in M}\chi^{(k)}(m)\mu^{(i)}(m^{-1}) \qquad (42.18)$$

而此式的右边正是在群G的不可约表示(k)中，子群M的不可约表示(i)的重复度。因而又可写

$$\chi^{(k)}(m)=\sum_{i}a_{ki}\mu^{(i)}(m),\ m\in M \qquad (42.19)$$

(42.17)与(42.19)给出一个关于诱导表示的基本定理(Frobenius互反性)：在由子群M的不可约表示(i)诱导出的群G的表示当中，G的不可约表示(k)的出现次数，等于(i)在(k)中出现的次数。

42.3 诱导表示的不可约性判据

诱导表示一般是可约的，例如置换群的外积表示就属于这种情况。但在一定条件下，诱导表示也可以是不可约的。用诱导表示由子群的已知表示来构造母群的表示时，对所得表示的可约性作出判断，显然是很重要的。可以导出一个判据，利用它在具体作出诱导表示之前就可判断其可约性。显然，这样的判据应只与群的结构以及所取子群的已知表示有关。

由 18.3 小节的(18.4)式知，诱导表示(42.10)为不可约的充要条件是：其特征 $\chi_i(g)$满足

$$\frac{1}{N(G)}\sum_{g\in G}\chi_i(g)\chi_i(g^{-1})=1 \qquad (42.20)$$

上式中的 $\chi_i(g)$用(42.11)代入，用推导(42.19)时所用的方法可得

$$\frac{1}{N(M)}\sum_{m\in M}\chi_i(m)\mu^{(i)}(m^{-1})=1 \qquad (42.21)$$

令(42.11)中的 $g=m$，再将 $\chi_i(m)$代入上式，则(42.21)的左边化为（注意(42.13)）

$$\sum_{l=1}^{q}\frac{1}{N(M)}\sum_{\substack{m\\(g_l^{-1}mg_l\in M)}}\mu^{(i)}(g_l^{-1}mg_l)\mu^{(i)}(m^{-1})$$

其中对m的求和，只限于满足 $m\in M$和 $g_l^{-1}mg_l\in M$ 的 m，后一条件也可写为 $m\in g_lMg_l^{-1}$。$g_lMg_l^{-1}$ 是M由 g_l 产生的共轭子群，以 Ml 表示M和 $g_lMg_l^{-1}$ 的公共元的集，即令

$$M_l=M\cap g_lMg_l^{-1} \qquad (42.22)$$

则 M_l 显然成群，且 $M_l\subset M(l=1,2,\cdots,q)$。现在对$m$求和时的限制可简单地写为 $m\in M_l$，从而(42.21)被化为

$$\sum_{l=1}^{q}\frac{1}{N(M)}\sum_{m\in Ml}\mu^{(i)}(g_l^{-1}mg_l)\mu^{(i)}(m^{-1})=1 \qquad (42.23)$$

注意到 $l=1$ 时，$g_1=e$，$M_1=M$，则上式中 $l=1$ 的项为

$$\frac{1}{N(M)}\sum_{m\in M}\mu^{(i)}(m)\mu^{(i)}(m^{-1})=1$$

（$\mu^{(i)}$是群M的单纯特征标）。从而(42.23)又可写为

$$\sum_{l=2}^{q}\frac{1}{N(M)}\sum_{m\in Ml}\mu^{(i)}(g_l^{-1}mg_l)\mu^{(i)}(m^{-1})=0 \qquad (42.24)$$

M的特征标 $\mu^{(i)}(m)$，自然也是子群 M_l 的特征标。但当 $m\in M_l$时，虽有 $g_l^{-1}mg_l\in M$，一般却没有 $g_l^{-1}mg_l\in M_l$，那

么 $\mu_l^{(i)}(m)=\mu^{(i)}(g_l^{-1}mg_l)$是否是 M_l 的某个表示的特征标呢？回答是肯定的。令

$$m\longrightarrow A_l^{(i)}(m)\equiv A^{(i)}(g_l^{-1}mg_l),\ m\in M_l \quad (42.25)$$

$A_l^{(i)}(m)$显然满足

$$A_l^{(i)}(m_1m_2)=A_l^{(i)}(m_1)A_l^{(i)}(m_2),\ m_1,m_2\in M_l$$

（注意利用 $A^{(i)}$是M的表示——同态象）。所以$A_l^{(i)}(m)$是M_l的一个表示，而 $\mu^{(i)}(g_l^{-1}mg_l)(m\in M_l)$正是这个表示的特征标。由特征标的基本性质3°（17.1节）和单纯特征标的正交关系可知，同一群的任意两个特征标的内积都是非负整数

$$(\chi,\ \chi')=\sum_i a_ia_i'\cdot N(G) \quad (42.26)$$

其中 a_i 和 a_i' 分别是 χ 和 χ' 中第 i 个不可约成分的重复度，$N(G)$是群的阶。从而有

$$\sum_{m\in M_l}\mu^{(i)}(g_l^{-1}mg_l)\mu^{(i)}(m^{-1})\geqslant 0$$

由此可见，(42.23)成立的充要条件为

$$\begin{cases}\sum\limits_{m\in M_l}\mu^{(i)}(g_l^{-1}mg_l)\mu^{(i)}(m^{-1})=0\\ l=2,3,\cdots,q\end{cases} \quad (42.27)$$

这就是由子群M的不可约表示 $A^{(i)}$所生成的母群G的诱导表示为不可约的充要条件（判据）。

由(42.26)可以看出，两个特征标的内积为零的充要条件是，两个表示不含公共的不可约成分。于是，判据(42.27)又可表述为：

群$M_l(l=2,3,\cdots,q)$的表示 $A_l^{(i)}$ 和 $A^{(i)}|_{M_l}$ 不含公共的不可约成分。

若M为G的不变子群，则有

$$g_lMg_l^{-1}=M \qquad M_l=M$$

这时判据(42.27)简化为

$$\begin{cases}\sum\limits_{m\in M}\mu^{(i)}(g_l^{-1}mg_l)\mu^{(i)}(m^{-1})=0\\ l=2,3,\cdots,q\end{cases}\qquad(42.28)$$

这个条件也可等价地表述为：

对于任意的 $g\overline{\in}M$，M的不可约表示 $A_g^{(i)}(m)\equiv A^{(i)}(g^{-1}mg)$与 $A^{(i)}(m)$不等价。

§43 空间群的不可约表示

43.1 由波矢群的不可约表示诱导空间群的不可约表示

设 $G=\{(\alpha|\boldsymbol{t})\}=\{(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha)+\boldsymbol{n})\}=\{(\varepsilon|\boldsymbol{n})(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))\}$ 为某一个空间群，其格群和点群分别为$H=\{(\varepsilon|\boldsymbol{n})\}$，$G_0=\{\alpha\}$. H是G的一个不变子群；但一般地，G_0 并不是（同构于）G 的子群。当G是一简单空间群时，有$\boldsymbol{v}(\alpha)=0$ ($\alpha\in G_0$)，这时的$\{(\alpha|0)\}$成群，是G的一个子群，且有

$$\{(\alpha|0)\}\cong G_0 \qquad (43.1)$$

因而 G_0 是G的子群。当G是非简单空间群时，至少有一个$\alpha\in G_0$，使 $\boldsymbol{v}(\alpha)\neq 0$，这时与(43.1)相应的$G$的子集是$\{(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))\}$，但这个子集不成群，所以$G_0$不是（或不同构于）$G$的子群。不过，这时若将$(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))$与$(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha)+\boldsymbol{n})$（对所有$\boldsymbol{n}$）等同看待，并用“$(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))$”表示，则$\{$“$(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))$”$:\alpha\in G_0\}$显然成群，且有

$$\{\text{“}(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))\text{”}:\alpha\in G_0\}\cong G_0 \qquad (43.2)$$

这是对(43.1)的一种推广。但“$(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))$”并不是 G 的元，它实际上是格群H的陪集

$$\text{“}(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))\text{”}=(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))H=H(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))$$

它们所成的群是H在G中的陪集的群，即G对于H的商群（见(9.11)），而(43.2)也可由同态定理得出（见 10.3 节的例 4）

$$\{(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))H:\alpha\in G_0\}=G/H\cong G_0 \qquad (43.3)$$

我们将用求诱导表示的方法来建立空间的不可约表示。为此，首先寻求空间群一些适当的子群，使得由这样的子群的不可约表示所诱导出的空间群表示也是不可约的。最先想到的子群是格群H。H的不可约表示由布里渊区上的波矢$\boldsymbol{k}$来标记

$$A^{(k)}((\varepsilon|\boldsymbol{n}))=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}} \tag{43.4}$$

H是G的正规（不变）子群，对不属于H的G的任意元$(\alpha|\boldsymbol{t})$ $(\alpha\neq\varepsilon)$，有

$$(\alpha|\boldsymbol{t})^{-1}(\varepsilon|\boldsymbol{n})(\alpha|\boldsymbol{t})=(\varepsilon|\alpha^{-1}\boldsymbol{n}) \tag{43.5}$$

因而

$$\begin{aligned}A_{\alpha}^{(\boldsymbol{k})}((\varepsilon|\boldsymbol{n}))&=A^{(k)}((\varepsilon|\alpha^{-1}\boldsymbol{n})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\alpha^{-1}\boldsymbol{n}}\\&=e^{i\alpha\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}=A^{(\alpha k)}\end{aligned} \tag{43.6}$$

上式最后第二步用到了点操作算子（矩阵）α的正交性

$$\alpha\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}=\boldsymbol{k}\cdot\alpha^{-1}\boldsymbol{n} \tag{43.7}$$

由上节末给出的判据知，由$A^{(k)}$诱导出的G的表示不可约的充要条件为：对任意$\alpha\neq\varepsilon$，H的表示$A_{\alpha}^{(\boldsymbol{k})}=A^{(\alpha k)}$与$A^{(\boldsymbol{k})}$不等价

$$\alpha\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{k}+\boldsymbol{m},\ \alpha\in G_0,\ \alpha\neq\varepsilon \tag{43.8}$$

由此可知：当$\boldsymbol{k}$为布里渊区的一般点$(G_0(k)=C_1)$时，$A^{(k)}$的诱导表示是不可约的；当$\boldsymbol{k}$为布里渊区的非一般点，例如表面上或对称面、对称轴、对称中心上的点$(G_0(\boldsymbol{k})\neq C_1)$时，$A^{(k)}$的诱导表示是可约的。即只有$H$的一部分不可约表示能够诱导出$G$的不可约表示。

为了求得G的更多的不可约表示，我们需要对子群H加以扩充，使得新的子群含有H，且其所有不可约表示的诱导表示都是不可约的。为此，引入波矢群$G(\boldsymbol{k})$.

考虑G的一个子集，其中各操作的点操作部分使某一波矢$\boldsymbol{k}$不变或变为等价波矢，即这些操作的点操作部分恰好跑遍波矢$\boldsymbol{k}$的点群$G_0(\boldsymbol{k})$. G的这样一个子集显然成群，因而是G的子群，称为波矢群，记作$G(\boldsymbol{k})$

$$G(\boldsymbol{k})=\{(\alpha\ |\boldsymbol{t}):\ \alpha\in G_0(\boldsymbol{k})\}\qquad(43.9)$$

因 $\varepsilon\in G_0(\boldsymbol{k})$，故$G(\boldsymbol{k})$包含所有元$(\varepsilon\ |\boldsymbol{n})$（注意式(3.6)：$\boldsymbol{v}(\varepsilon)=0$），即包含格群$H$

$$G\supset G(\boldsymbol{k})\supset H\qquad(43.10)$$

又，$G_0(\boldsymbol{k})$是G的点群G_0的子群

$$G_0\supset G_0(\boldsymbol{k})\qquad(43.11)$$

它也是一个晶体点群。对每个波 $\boldsymbol{k}$，都有一个波矢群 $G(\boldsymbol{k})$，所以作为给定空间群的子群的波矢群的个数为N^3（限于互不等价的波矢）$\to\infty$。

波矢群 $G(\boldsymbol{k})$的不可约表示有一个特点：它作为子群 H 的表示时，所含的H的不可约成分为$\{A^{(\gamma\boldsymbol{k}_0)}:\ \gamma\in G_0(\boldsymbol{k})\}$，中其 $\boldsymbol{k}_0$ 是某一确定波矢。事实上，$G(\boldsymbol{k})$的任意不可约表示总可取为已对子群H约化的形式，于是至少有一个 $A^{(\boldsymbol{k})}$在其中出现，而整个不可约空间可由用 $G(\boldsymbol{k})$的算子作用于与 $A^{(\boldsymbol{k}_0)}$相应的基矢 $u_{\boldsymbol{k}_0}$ 所生成的矢量集$\{(\gamma\ |\boldsymbol{\tau})u_{\boldsymbol{k}_0}:\ (\gamma\ |\boldsymbol{\tau})\in G(\boldsymbol{k})\}$来张成。这个矢量集中的线性独立矢量便形成 $G(\boldsymbol{k})$的一组不可约基，每个基矢都有$(\gamma\ |\boldsymbol{\tau})u_{\boldsymbol{k}_0}$ 的形状。又由(43.5)和(43.7)可得

$$(\varepsilon\ |\boldsymbol{n})[(\gamma\ |\boldsymbol{\tau})u_{\boldsymbol{k}_0}]=e^{i\gamma\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{n}}[(\gamma\ |\boldsymbol{\tau})u_{\boldsymbol{k}_0}]\qquad(43.12)$$

这表明矢量

$$v_{\gamma\boldsymbol{k}_0}=(\gamma\ |\boldsymbol{\tau})u_{\boldsymbol{k}_0}$$

是H的属于 $A^{(\gamma\boldsymbol{k}_0)}$ 的不可约基。此外，由正交性定理知，当$A^{(\gamma\boldsymbol{k}_0)}$与$A^{(\gamma'\boldsymbol{k}_0)}$不等价时，$v_{\gamma\boldsymbol{k}_0}$与 $v_{\gamma'\boldsymbol{k}_0}$是正交的。因而所有彼此不等价的 $A^{(\gamma\boldsymbol{k}_0)}(\gamma\in G_0(\boldsymbol{k}))$都在 $G(\boldsymbol{k})$的此不可约表示中出现（至少一次）。这就证明了，$G(\boldsymbol{k})$的不可约表示中所含的H的不可约成分的集合为$\{A^{(\gamma\boldsymbol{k}_0)}:\ \gamma\in G_0(\boldsymbol{k})\}$（不计次数）。

但为了诱导G的不可约表示这一目标，并不需要考虑$G(\boldsymbol{k})$的全部不可约表示。下面我们只考虑 $\boldsymbol{k}_0=\boldsymbol{k}$ 的特殊情形，这时

$G(\boldsymbol{k})$的不可约表示$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}$中只含有H的不可约成分$A^{(\boldsymbol{k})}$，因为这时所有的$A^{(\gamma\boldsymbol{k})}(\gamma\in G_0(\boldsymbol{k}))$都与$A^{(\boldsymbol{k})}$等价。因此，对于$G(\boldsymbol{k})$的每个这种类型的表示，有

$$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}|_H=\underbrace{A^{(\boldsymbol{k})}\oplus A^{(\boldsymbol{k})}\oplus\cdots\oplus A^{(\boldsymbol{k})}}_{n_\nu\text{个}} \tag{43.13}$$

其中n_ν为$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}$的维数。

利用(43.12)容易证明，由$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}$诱导出的G的表示是不可约的。按上节中给出的判据，如果诱导表示可约，则$A_\alpha^{(\boldsymbol{k},\nu)}$和$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}|_{M_\alpha}$将含有公共不可约成分，此处

$$M_\alpha=G(\boldsymbol{k})\cap(\alpha\,|\boldsymbol{t})G(\boldsymbol{k})(\alpha\,|\boldsymbol{t})^{-1},\quad \alpha\bar{\in}G_0(\boldsymbol{k})$$

容易验证，共轭子群$(\alpha\,|\boldsymbol{t})G(\boldsymbol{k})(\alpha|\,\boldsymbol{t})^{-1}$含有$H$（注意$H$是$G$的不变子群），所以$H$是$M_\alpha$的子群。因此，$M_\alpha$的表示$A_\alpha^{(\boldsymbol{k},\nu)}$和$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}|_{M_\alpha}$也含有$H$的公共不可约成分。但由(42.25)，有

$$\begin{aligned}A_\alpha^{(\boldsymbol{k},\nu)}((\varepsilon\,|\boldsymbol{n}))&=A^{(\boldsymbol{k},\nu)}[(\alpha\,|\boldsymbol{t})^{-1}(\varepsilon\,|\boldsymbol{n})(\alpha\,|\boldsymbol{t})]\\&=A^{(\boldsymbol{k},\nu)}((\varepsilon\,|\alpha^{-1}\boldsymbol{n}))\\&=e^{i\alpha\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}\oplus e^{i\alpha\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}\oplus\cdots\oplus e^{i\alpha\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}\end{aligned}$$

或写为

$$A_\alpha^{(\boldsymbol{k},\nu)}|_H=\underbrace{A^{(\alpha\boldsymbol{k})}\oplus A^{(\alpha\boldsymbol{k})}\oplus\cdots\oplus A^{(\alpha\boldsymbol{k})}}_{n_\nu\text{个}} \tag{43.14}$$

对比(43.13)和(43.14)，并注意

$$A^{(\alpha\boldsymbol{k})}\not\simeq A^{(\boldsymbol{k})},\quad \alpha\bar{\in}G_0(\boldsymbol{k}) \tag{43.15}$$

可知，$A_\alpha^{(\alpha\boldsymbol{k})}$和$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}|_{M_\alpha}$不含$H$的公共不可约成分。这就证明了关于诱导表示可约的假定是不能成立的。

上面证明了$G(\boldsymbol{k})$的每个不可约表示$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}$诱导出G的一个不可约表示，我们进一步证明用这种方法可以穷尽G的全部不可约表示，即：G的任一不可约表示都等价于G的某一波矢群$G(\boldsymbol{k})$的一个不可约表示$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}$的诱导表示。

设$\mathscr{V}$是G的任一不可约表示的空间，因总可将此表示对子

群H约化，故$\mathscr{V}$的基矢总可取为H的不可约基。若在G的上述表示中含有H的不可约成分$A^{(k)}$，则$\mathscr{V}$中至少有一个属于$A^{(k)}$的基矢u_k. 将$G(\boldsymbol{k})$的算子作用于这个u_k，所生成的矢量集$\{(\gamma|\boldsymbol{\tau})u_k:(\gamma|\boldsymbol{\tau})\in G(\boldsymbol{k})\}$张成$\mathscr{V}$的一个对$G(\boldsymbol{k})$不变的子空间，由(43.12)知，这个子空间中的所有矢量都是H的属于$A^{(k)}$的不可约基。再将此子空间按$G(\boldsymbol{k})$约化，并在其中任取一个不可约子空间$\mathscr{V}_k$. 则$\mathscr{V}_k$中的矢量也全是H的属于$A^{(k)}$的不可约基，即在$\mathscr{V}_k$所荷载的$G(\boldsymbol{k})$的不可约表示中，只含H的不可约成分$A^{(k)}$. 可见，$G(\boldsymbol{k})$的以$\mathscr{V}_k$为表示空间的不可约表示属于前述的类型，记作$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}$.

我们来作出$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}$的诱导表示。为此，将G按$G(\boldsymbol{k})$的左陪集分解。由(43.9)，$G(\boldsymbol{k})$是用波矢的点群$G_0(\boldsymbol{k})$来定义的，即$(\gamma|\boldsymbol{\tau})\in G(\boldsymbol{k})\Longleftrightarrow\gamma\in G_0(\boldsymbol{k})$. 因而，若$\{\alpha_1, \alpha_2,\cdots,\alpha_q\}$是$G_0(\boldsymbol{k})$在$G_0$中的左陪集的代表元($\alpha_1=\varepsilon$)，则$\{(\alpha_1|\boldsymbol{v}(\alpha_1)),(\alpha_2|\boldsymbol{v}(\alpha_2)),\cdots,(\alpha_q|\boldsymbol{v}(\alpha_q))\}$便是$G(\boldsymbol{k})$在$G$中的左陪集的代表元，反之亦然。将$(\alpha_l|\boldsymbol{v}(\alpha_l))$作用于$\mathscr{V}_k$中的所有矢量，得出$\mathscr{V}$的一个子空间

$$\mathscr{V}_{\alpha_l k}=(\alpha_l|\boldsymbol{v}(\alpha_l))\mathscr{V}_k \qquad (43.16)$$

由(43.12)知，$\mathscr{V}_{\alpha_l k}$中的所有矢量都是H的属于$A^{(\alpha_l k)}$的不可约基。又在41.3节中已经指出，波矢集

$$\{\alpha_1\boldsymbol{k},\ \alpha_2\boldsymbol{k},\cdots,\alpha_q\boldsymbol{k}\} \qquad ((41.24))$$

中的波矢互不等价，即$\{A^{(\alpha_l k)}: l=1,2,\cdots,q\}$是互不等价的。由此可知，$\mathscr{V}$的$q$个子空间$\{\mathscr{V}_{\alpha_l k}: l=1,2,\cdots,q\}$是两两正交的。这就证明了

$$\mathscr{V}_{\alpha_1 k}\oplus\mathscr{V}_{\alpha_2 k}\oplus\cdots\oplus\mathscr{V}_{\alpha_q k}$$

形成了$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}$的诱导表示空间；它显然仍是$\mathscr{V}$的一个子空间。但事先已假定$\mathscr{V}$是不可约的，即$\mathscr{V}$没有在G下不变的真子空间，故必须有

$$\mathscr{V}=\mathscr{V}_{a_1 k}\oplus\mathscr{V}_{a_2 k}\oplus\cdots\oplus\mathscr{V}_{a_q k} \tag{43.17}$$

即$\mathscr{V}$本身就是 $A^{(k,\nu)}$的诱导表示空间。

总之，为了求得空间群G的全部不可约表示，只需作出各波矢群 $G(\boldsymbol{k})$的 $A^{(k,\nu)}$型的不可约表示，再作出每个 $A^{(k,\nu)}$ 的诱导表示，其中 $\boldsymbol{k}$ 跑遍布里渊区上的非等价点。

当 $\boldsymbol{k}$ 为布里渊区的一般点时，$G_0(\boldsymbol{k})=\{I\}$，因而$G(\boldsymbol{k})=H$，故$G$的相应的不可约表示即为$H$的不可约表示 $A^{(k)}$的诱导表示。所以，由H到 $G(\boldsymbol{k})$的推广，只有当 $\boldsymbol{k}$ 为非一般点时才是必要的，这时由 $A^{(k)}$ 诱导出的G的表示是可约的，由 $A^{(k,\nu)}$ 诱导出的G的表示才是不可约的。

43.2 波矢群 $G(\boldsymbol{k})$的不可约表示 $A^{(k,\nu)}$

上节中我们已将寻求空间群G的不可约表示的问题归结为寻求各波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的 $A^{(k,\nu)}$型的不可约表示的问题，现在来解决后一问题。

可能产生这样的问题：为了求一个空间群的表示，要求出许多波矢群的表示，而波矢群的复杂性是可以与原空间群相近甚至相同的，这岂不是将问题复杂化了吗？其实不然，因为对每个波矢群 $G(\boldsymbol{k})$，只需求出 $A^{(k,\nu)}$ 型的表示，这就使整个问题简单多了。例如，对 $\boldsymbol{k}=0$ 点的波矢群 $G(0)$，因 $G_0(0)=G_0$，有 $G(0)=G$，即 $\boldsymbol{k}=0$ 点的波矢群就是空间群本身。但现在只需求G的 $A^{(0,\nu)}$ 型的表示，而寻求G的其他表示则归结为寻求 $G(\boldsymbol{k})(\boldsymbol{k}\neq 0)$的 $A^{(k,\nu)}$ 型的表示。

对于 $A^{(k,\nu)}$ 型的表示，其表示空间$\mathscr{V}_k$（略去了标记ν）中的任意矢量 u_k 都满足

$$(\varepsilon\,|\boldsymbol{n})u_k=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}u_k,\quad u_k\in\mathscr{V}_k \tag{43.18}$$

为了求表示 $A^{(k,\nu)}$，我们将 $G(\boldsymbol{k})$的元看作是局限于空间$\mathscr{V}_k$上的线性算子。这时，(43.18)表明

$$(\varepsilon\,|\boldsymbol{n})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}} \tag{43.19}$$

即$(\varepsilon|\boldsymbol{n})$为恒等算子的$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}$倍，而$G(\boldsymbol{k})$的一般元在$\mathscr{V}_k$上的算子表示可写为

$$(\varepsilon|\boldsymbol{n})(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)) \tag{43.20}$$

为了后面讨论的方便，在此先对线性算子$(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))$作一规范变换

$$(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))'=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma)}(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)) \tag{43.21}$$

于是(43.20)化为

$$(\varepsilon|\boldsymbol{n})(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))=e^{i\boldsymbol{k}\cdot[\boldsymbol{v}(\gamma)+\boldsymbol{n}]}(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))' \tag{43.22}$$

或

$$(\gamma|\boldsymbol{\tau})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\tau}}(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))' \tag{43.23}$$

$$\boldsymbol{\tau}=\boldsymbol{v}(\gamma)+\boldsymbol{n} \tag{43.24}$$

由此可见，$\mathscr{V}_k$在$G(\boldsymbol{k})$下不可约的充要条件，是$\mathscr{V}_k$在算子集合

$$\{(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))':\ \gamma\in G_0(\boldsymbol{k})\} \tag{43.25}$$

下不可约。这样就将求$G(\boldsymbol{k})$的$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}$型的不可约表示的问题简化为求(43.25)的不可约表示的问题。若$D^{(\nu)}[(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))']$为(43.25)的一个不可约表示，则由(43.23)可知，其表示空间也是$G(\boldsymbol{k})$的不可约表示空间，且$G(\boldsymbol{k})$的这个表示为

$$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}[(\gamma|\boldsymbol{\tau})]=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\tau}}\cdot D^{(\nu)}[(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))'] \tag{43.26}$$

对于$\boldsymbol{v}(\gamma)=0$的情形，由(43.21)有$(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))'=(\gamma|0)$，这时(43.25)成群且与$G_0(\boldsymbol{k})$同构，因而(43.25)的表示直接由$G_0(\boldsymbol{k})$的表示给出。用§19的方法容易作出点群$G_0(\boldsymbol{k})$的不可约表示的完整表$\{D^{(\nu)}(\gamma)\}$，代入(43.26)即得$G(\boldsymbol{k})$的全部$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}$型的不可约表示

$$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}[(\gamma|\boldsymbol{n})]=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}D^{(\nu)}(\gamma),\quad(\gamma|\boldsymbol{n})\in G(\boldsymbol{k}) \tag{43.27}$$

对于$\boldsymbol{v}(\gamma)$不全为零的波矢群$G(\boldsymbol{k})$，(43.25)不一定成群。为了分析这种情形，先考察(43.25)中的算子的乘法。由(43.21)和(43.20)有

$$(\gamma_1|\boldsymbol{v}(\gamma_1))'(\gamma_2|\boldsymbol{v}(\gamma_2))'=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot[\boldsymbol{v}(\gamma_1)+\boldsymbol{v}(\gamma_2)]}(\gamma_1|\boldsymbol{v}(\gamma_1))(\gamma_2|\boldsymbol{v}(\gamma_2))$$

$$=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot[\boldsymbol{v}(\gamma_1)+\boldsymbol{v}(\gamma_2)]}(\gamma_1\gamma_2\,|\boldsymbol{v}(\gamma_1\gamma_2)+\boldsymbol{n}_{12})$$

$$=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot[\boldsymbol{v}(\gamma_1)+\boldsymbol{v}(\gamma_2)]}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}_{12}}(\gamma_1\gamma_2\,|\boldsymbol{v}(\gamma_1\gamma_2))$$

$$=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot[\boldsymbol{v}(\gamma_1)+\boldsymbol{v}(\gamma_2)]}\cdot e^{i\boldsymbol{k}\cdot v n_{12}}\cdot e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma_1\gamma_2)}(\gamma_1\gamma_2\,|\boldsymbol{v}(\gamma_1\gamma_2))'$$

其中 $\boldsymbol{n}_{12}$ 是一格矢，由空间操作的一般乘法规则(3.2)，可具体写出

$$\boldsymbol{n}_{12}=\gamma_1\boldsymbol{v}(\gamma_2)+\boldsymbol{v}(\gamma_1)-\boldsymbol{v}(\gamma_1\gamma_2)$$

将此代入上式，并注意 $\boldsymbol{k}\cdot\gamma_1\boldsymbol{v}(\gamma_2)=\gamma_1^{-1}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma_2)$ （见(43.7)式）．可得乘法公式

$$(\gamma_1\,|\boldsymbol{v}(\gamma_1))'(\gamma_2\,|\boldsymbol{v}(\gamma_2))'=e^{i(\gamma_1^{-1}\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{v}(\gamma_2)}(\gamma_1\gamma_2\,|\boldsymbol{v}(\gamma_1\gamma_2))' \tag{43.28}$$

当 $\boldsymbol{k}$ 在布里渊区的内部时，它在布里渊区上无等价波矢，故必有

$$\gamma\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k},\ \gamma\in G_0(\boldsymbol{k}) \tag{43.29}$$

从而(43.28)变成

$$(\gamma_1\,|\boldsymbol{v}(\gamma_1))'(\gamma_2\boldsymbol{v}(\gamma_2))'=(\gamma_1\gamma_2\,|\boldsymbol{v}(\gamma_1\gamma_2))' \tag{43.30}$$

上式表明，这时(43.25)成群且与 $G_0(\boldsymbol{k})$ 同构。因而(43.25)的不可约表示即 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的不可约表示：

$$D^{(\nu)}[(\gamma\,|\boldsymbol{v}(\gamma))']=D^{(\nu)}(\gamma),\ \gamma\in G_0(\boldsymbol{k})$$

代入(43.26)便得 $G(\boldsymbol{k})$ 的不可约表示

$$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}[(\gamma\,|\boldsymbol{\tau})]=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\tau}}D^{(\nu)}(\gamma),\ (\gamma\,|\boldsymbol{\tau})\in G(\boldsymbol{k}) \tag{43.31}$$

以上结果表明，对于布里渊区内部的波矢 $\boldsymbol{k}$，或者 $\boldsymbol{k}$ 在布里渊区的边界上但 $G(\boldsymbol{k})$ 的 $\boldsymbol{v}(\gamma)$ 全为零时，波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的 $A^{(\boldsymbol{k},\nu)}$ 型的不可约表示均可简单地由波矢点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的不可约表示 $D^{(\nu)}$（通过(43.31)或(43.27)）表出。因而，仅当 $\boldsymbol{k}$ 在布里渊区的边界上且 $G(\boldsymbol{k})$ 的 $\boldsymbol{v}(\gamma)$ 不全为零时，才可能出现比较复杂的情况。这时至少有一个 $\gamma^{-1}\in G_0(\boldsymbol{k})$，使

$$\gamma^{-1}\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{m}(\gamma) \tag{43.32}$$

$\boldsymbol{m}(\gamma)$ 是一个与 γ 有关的非零倒格矢。于是又可将(43.28)写为

$$(\gamma_1|\boldsymbol{v}(\gamma_1))'(\gamma_2|\boldsymbol{v}(\gamma_2))'=e^{im(\gamma_1)\cdot v(\gamma_2)}(\gamma_1\gamma_2|\boldsymbol{v}(\gamma_1\gamma_2))'$$
$$=\eta(\gamma_1,\gamma_2)(\gamma_1\gamma_2|\boldsymbol{v}(\gamma_1\gamma_2))' \qquad (43.33)$$
$$\eta(\gamma_1,\gamma_2)=e^{im(\gamma_1)\cdot v(\gamma_2)} \qquad (43.34)$$

由此可见，除非$\eta(\gamma_1,\gamma_2)=1$，(43.25)是不成群的，因而这时不能由已知点群的不可约表示作出(43.25)的不可约表示。

在$\eta(\gamma_1,\gamma_2)\neq1$的情况下，为了利用群表示论的知识作出(43.25)的不可约表示$D^{(\nu)}[(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))']$，可以将(43.25)扩充成为一个算子群。这个群由(43.25)中的所有算子及其所有可能的幂次之积组成，即是由(43.25)按乘法规则(43.33)和(43.34)生成的群，记为G_k. 由此定义易见，G_k的每个不可约表示也是其子集(43.25)的不可约表示，反之亦然。因此，在这种情况下，群G_k代替了$G_0(\boldsymbol{k})$($G_k\cong G_0(\boldsymbol{k})\Longleftrightarrow\eta(\gamma_1,\gamma_2)=1$)，求出$G_k$的所有不可约表示$D^{(\nu)}$，代入(43.26)即得到$G(\boldsymbol{k})$的全部$A^{(k,\nu)}$.

43.3 群 G_k 的结构

由(43.33)不难看出，群G_k的一般元可以写为

$$g=\lambda(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))' \qquad (34.35)$$

其中数λ是若干个η((43.34))的乘积，称为算子$(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))'$的扩展因子。我们先研究$(\varepsilon|0)'$的扩展因子。注意到$\boldsymbol{m}(\varepsilon)=0$，由(43.33)可得

$$(\varepsilon|0)'(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))'=(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))'(\varepsilon|0)'=(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))' \qquad (34.36)$$

从而有

$$(\varepsilon|0)'g=g(\varepsilon|0)'=g, \qquad g\in G_k \qquad (34.37)$$

即$(\varepsilon|0)'$是群G_k的单位元。考虑$(\varepsilon|0)'$的扩展因子的集合，我们证明此集合成群：显然数1是一个扩展因子；若λ和λ'是$(\varepsilon|0)'$的扩展因子，则由$[\lambda(\varepsilon|0)']^{-1}=\lambda^{-1}(\varepsilon|0)'\in G_k$和$[\lambda(\varepsilon|0)'][\lambda'(\varepsilon|0)']=\lambda\lambda'(\varepsilon|0)'\in G_k$知，$\lambda^{-1}$和$\lambda\lambda'$都是$(\varepsilon|0)'$的扩展因子。

由3.1和3.4节中关于矢量$\boldsymbol{v}(\alpha)$的讨论可知，在157个非简单空间群中，非基本平移矢量$\boldsymbol{v}(\alpha)$只能取以下形式

$$\begin{cases} \boldsymbol{v}=\dfrac{1}{n}(n_1\boldsymbol{e}_1+n_2\boldsymbol{e}_2+n_3\boldsymbol{e}_3) \\ n=2,3,4,6; \qquad n_i=0,1,\cdots,n-1 \end{cases} \tag{34.38}$$

其中$\{\boldsymbol{e}_i\}$为格矢的基。再由(41.10)和(41.15)，易见(43.34)只能取值

$$\begin{cases} \eta(\gamma_1,\gamma_2)=e^{2\pi mi/n} \\ n=2,3,4,6; \qquad m=0,1,\cdots,n-1 \end{cases} \tag{34.39}$$

从而$(\varepsilon|0)'$的扩展因子$\lambda=e^{i\varphi}$只有有限个不同的值，而$(\varepsilon|0)'$的扩展因子群$\{e^{i\varphi}\}$是个有限群。让φ对应于定轴转动的转角，则$\{e^{i\varphi}\}$同构于一个有限定轴转动群。在2.4节中证明过，有限定轴转动群必有一最小转角$\varphi_0=\dfrac{2\pi}{l}$，其余转角为$2\pi\cdot\dfrac{2}{l}$，$2\pi\cdot\dfrac{3}{l},\cdots,2\pi\dfrac{l-1}{l}$，0（或$2\pi$）；$l$是一自然数。由此得知：$(\varepsilon|0)'$的扩展因子群是一个$l$阶的循环群

$$\{\lambda\}=\{1,\ e^{2\pi i/l},\ e^{4\pi i/l},\cdots,e^{2\pi i(l-1)/l}\} \tag{34.40}$$

这是l个复数的群，l个复数等分复平面的单位圆的圆周，其中一个在正实轴上(1)。

再考虑$(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))'(\gamma\neq\varepsilon)$的扩展因子的集合，我们要证明它与$(\varepsilon|0)'$的扩展因子的集合相同，也是(34.40)。设$\lambda$是$(\varepsilon|0)'$的一个扩展因子，则$\lambda(\varepsilon|0)'$是$G_k$的元，因而$\lambda(\varepsilon|0)'(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))'=\lambda(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))'$（见(34.36)）也是$G_k$的元，所以$\lambda$也是$(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))'$的一个扩展因子。反之，设$\lambda$是$(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))'$的一个扩展因子，则$\lambda(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))'$是$G_k$的元，因而

$$\lambda(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))'(\gamma^{-1}|\boldsymbol{v}(\gamma^{-1}))'=\lambda\eta(\gamma,\gamma^{-1})(\varepsilon|0)'$$

是G_k的元，故$\lambda\eta(\gamma,\gamma^{-1})$是$(\varepsilon|0)'$的扩展因子。但由$(\gamma|v(\gamma))'(\gamma^{-1}|v(\gamma^{-1}))'=\eta(\gamma,\gamma^{-1})(\varepsilon|0)'$知，$\eta(\gamma,\gamma^{-1})$是$(\varepsilon|0)'$的一个扩展因子，故由群性质知$(\lambda\eta)\eta^{-1}=\lambda$也是$(\varepsilon|0)'$的扩展因子。这就证明了，所有的$(\gamma|v(\gamma))'(\gamma\in G_0(\boldsymbol{k}))$都具有相同的扩展因子集合(34.40)。

总之，群G_k的元可以写为

$$\begin{cases} g_\gamma^{(m)}=e^{2\pi i m/l}(\gamma|v(\gamma))' \\ \gamma\in G_0(\boldsymbol{k});\ \ m=0,1,\cdots,l-1 \end{cases} \tag{43.41}$$

其阶数为$l\cdot N(G_0(\boldsymbol{k}))$，是$G_0(\boldsymbol{k})$的阶数的$l$倍。这个群称为$G_0(\boldsymbol{k})$的$l$次覆盖群。

群G_k的乘法表仅由其部分元素$\{g_\gamma^{(0)}=(\gamma|v(\gamma))'\}$的乘法关系确定。事实上，若知

$$g_{\gamma_1}^{(0)}g_{\gamma_2}^{(0)}=e^{2\pi i m_{12}/l}(\gamma_1\gamma_2|v(\gamma_1\gamma_2))'=g_{\gamma_1\gamma_2}^{(m_{12})} \tag{43.42}$$

则由(43.41)可得出任二元的乘法

$$g_{\gamma_1}^{(m_1)}\ g_{\gamma_2}^{(m_2)}=g_{\gamma_1\gamma_2}^{(m_1+m_2+m_{12})}=e^{2\pi i(m_1+m_2)/l}\ g_{\gamma_1\gamma_2}^{(m_{12})} \tag{43.43}$$

例如，若G_k为$G_0(\boldsymbol{k})$的二次覆盖群$(l=2)$，因这时的m、m_1、m_2、m_{12}只能取0和1两个值，(43.42)只有两种可能的方式

$$g_{\gamma_1}^{(0)}\ g_{\gamma_2}^{(0)}=\begin{cases} g_{\gamma_1\gamma_2}^{(0)} \\ g_{\gamma_1\gamma_2}^{(1)}=-\ g_{\gamma_1\gamma_2}^{(0)} \end{cases} \tag{43.44}$$

在第一种情况下有

$$g_{\gamma_1}^{(0)}g_{\gamma_2}^{(1)}=g_{\gamma_1}^{(1)}g_{\gamma_2}^{(0)}=g_{\gamma_1\gamma_2}^{(1)},\ \ g_{\gamma_1}^{(1)}g_{\gamma_2}^{(1)}=g_{\gamma_1\gamma_2}^{(0)} \tag{43.45}$$

在第二种情况下有

$$g_{\gamma_1}^{(0)}g_{\gamma_2}^{(1)}=g_{\gamma_1}^{(1)}g_{\gamma_2}^{(0)}=g_{\gamma_1\gamma_2}^{(0)},\ \ g_{\gamma_1}^{(1)}g_{\gamma_2}^{(1)}=g_{\gamma_1\gamma_2}^{(1)} \tag{43.46}$$

可见只要知道了$N(G_0(\boldsymbol{k}))$个元$\{g_\gamma^{(0)}:\ \gamma\in G_0(\boldsymbol{k})\}$的乘法关系，

即可写出全部$2N(G_0(\boldsymbol{k}))$个元$\{g_\gamma^{(0)},\ g_\gamma^{(1)}:\ \gamma\in G_0(\boldsymbol{k})\}$的乘法关系。至于诸$g_\gamma^{(0)}$的乘法关系(43.44)是两种可能方式中的哪一种，则取决于$G(\boldsymbol{k})$的具体结构，可由(43.34)算出

$$\boldsymbol{m}(\gamma_1)\cdot\boldsymbol{v}(\gamma_2)=2\pi\cdot\begin{cases}0\\ \\ \dfrac{1}{2}\end{cases}\tag{43.47}$$

一般地，确定乘法关系(43.42)或(43.43)的m_{12}，应由(43.34)给出

$$m_{12}=m(\gamma_1,\gamma_2)=\frac{l}{2\pi}\cdot\boldsymbol{m}(\gamma_1)\cdot\boldsymbol{v}(\gamma_2)\tag{43.48}$$

m_{12}有l个可取值：0，1，…，$l-1$。所以要作出群G_k的乘法表，只需算出$m(\gamma_1,\gamma_2)$的数值表，或相应的

$$e^{2\pi i m_{12}/l}=e^{i\boldsymbol{m}(\gamma_1)\cdot\boldsymbol{v}(\gamma_2)}=\eta(\gamma_1,\gamma_2)\tag{43.49}$$

的数值表。这表明作为$G_0(\boldsymbol{k})$的l次覆盖群的G_k，其具体结构不能完全由$G_0(\boldsymbol{k})$确定，还要通过(43.48)或(43.39)而取决于群$G(\boldsymbol{k})$。即G_k的乘法表同时由$G_0(\boldsymbol{k})$的乘法表与$\eta(\gamma_1,\gamma_2)$或$\boldsymbol{m}(\gamma_1)\cdot\boldsymbol{v}(\gamma_2)$的数值表决定。给出$G_k$的结构，只需给出这两张表，而前者（点群的乘法表）是已知的，故只需计算后一张表。

关于G_k的类，也可由$G_0(\boldsymbol{k})$的乘法表和$\eta(\gamma_1,\gamma_2)$的表来确定。由(43.41)有

$$g_\beta^{(k)}g_\gamma^{(m)}[g_\beta^{(k)}]^{-1}=g_\beta^{(0)}g_\gamma^{(m)}[g_\beta^{(0)}]^{-1}\tag{43.50}$$

可见，为了确定$g_\gamma^{(m)}$的所有共轭元，不必使用全部群元$g_\beta^{(k)}$，只需用到$N(G_0(\boldsymbol{k}))$个元$g_\beta^{(0)}$来对$g_\gamma^{(m)}$作变换。又

$$g_\beta^{(0)}g_\gamma^{(m)}[g_\beta^{(0)}]^{-1}=e^{2\pi i m/l}g_\beta^{(0)}g_\gamma^{(0)}[g_\beta^{(0)}]^{-1}\tag{43.51}$$

可见，只要将$g_\gamma^{(0)}$所属类中的元遍乘$e^{2\pi i m/l}$，便得出$g_\gamma^{(m)}$所属的类。故实际上只需确定$g_\gamma^{(0)}$型元所属的类，即确定$g_\gamma^{(0)}$的所有共轭元。由乘法规则(43.33)，有

$$[g_\beta^{(0)}]^{-1}=\eta(\beta,\beta^{-1})^{-1}(\beta^{-1}\,|\boldsymbol{v}(\beta^{-1}))' \qquad (43.52)$$

所以

$$g_\beta^{(0)}g_\gamma^{(0)}[g_\beta^{(0)}]^{-1}=\eta(\beta,\beta^{-1})^{-1}\cdot\eta(\beta,\gamma)\cdot\eta(\beta\gamma,\beta^{-1})g^{(0)}_{\beta\gamma\beta^{-1}} \qquad (43.53)$$

或写为

$$g_\beta^{(0)}g_\gamma^{(0)}[g_\beta^{(0)}]^{-1}=e^{2\pi i m/l}g^{(0)}_{\beta\gamma\beta^{-1}}=g^{(m)}_{\beta\gamma\beta^{-1}} \qquad (43.54)$$

$$m=\frac{l}{2\pi}[\boldsymbol{m}(\beta)\cdot\boldsymbol{v}(\gamma)+\boldsymbol{m}(\beta\gamma)\cdot\boldsymbol{v}(\beta^{-1})-\boldsymbol{m}(\beta)\cdot\boldsymbol{v}(\beta^{-1})] \qquad (43.55)$$

可见，与 $g_\gamma^{(0)}$共轭（同类）的元，只限于 $g^{(m)}_{\beta\gamma\beta^{-1}}$型的，其中 $\beta\gamma\beta^{-1}$ 与 γ 在点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 中共轭（同类），$m=m(\gamma,\beta)$ 由(43.55)确定。让 β 跑遍 $G_0(\boldsymbol{k})$，便由(43.54)得出 $g_\gamma^{(0)}$所属的类。

由(34.39)可见，G_k 可能是点群 $G_0(\boldsymbol{k})$的 $l=2$、3、4、6 次的覆盖群。在弄清了其结构和分类之后，便可用与求点群的不可约表示类似的办法求得 G_k 的不可约表示和单纯特征标。

43.4 空间群的不可约表示的标准矩阵

设(43.25)的不可约表示 $D^{(\nu)}[(\gamma\,|\boldsymbol{v}(\gamma)']$的不可约基为

$$\{u^{(\nu)}_{\boldsymbol{k},1},\ u^{(\nu)}_{\boldsymbol{k},2},\cdots,u^{(\nu)}_{\boldsymbol{k},n_\nu}\} \qquad (43.56)$$

其中下标 $\boldsymbol{k}$ 表明，$u^{(\nu)}_{\boldsymbol{k},i}$ 都是H的属于 $A^{(\boldsymbol{k})}$的不可约基，即满足

$$(\varepsilon\,|\boldsymbol{n})\boldsymbol{u}^{(\nu)}_{\boldsymbol{k},i}=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}\boldsymbol{u}^{(\nu)}_{\boldsymbol{k},i} \qquad (43.57)$$

而 $\boldsymbol{k}$ 为确定(43.25)的$G_0(\boldsymbol{k})$中的 $\boldsymbol{k}$ 值。则(43.56)也是$G(\boldsymbol{k})$的表示 $A^{(\boldsymbol{k},\nu)}$ 的不可约基，且 $A^{(\boldsymbol{k},\nu)}$的矩阵形状由(43.26)给出。

令$\{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_q\}$为 $G_0(\boldsymbol{k})$在 G_0 中的左陪集的代表元($\alpha_1=\varepsilon$)，则

$$\begin{cases}v^{(\nu)}_{\boldsymbol{k},ij}=(\alpha_j\,|\boldsymbol{v}(\alpha_j))u^{(\nu)}_{\boldsymbol{k},i}\\ i=1,2,\cdots,n_\nu;\ \ j=1,2,\cdots,q\end{cases} \qquad (43.58)$$

即为 $A^{(\boldsymbol{k},\nu)}$ 对 G 的诱导表示的不可约基。将此诱导表示的矩阵（在基(43.58)下）记为 $B^{(\boldsymbol{k},\nu)}$，若写为对基矢的脚标 j 分块的形状，由(42.10)有

$$\begin{cases} B^{(\boldsymbol{k},\nu)}_{j'j}[(\alpha|\boldsymbol{t})]=\delta_{j'l}A^{(\boldsymbol{k},\nu)}[(\gamma|\boldsymbol{\tau})] \\ (\alpha|\boldsymbol{t})(\alpha_j|\boldsymbol{v}(\alpha_j))=(\alpha_l|\boldsymbol{v}(\alpha_l))(\gamma|\boldsymbol{\tau}),\ (\gamma|\boldsymbol{\tau})\in G(\boldsymbol{k}) \end{cases} \tag{43.59}$$

上式表明，分块矩阵 $B^{(\boldsymbol{k},\nu)}[(\alpha|\boldsymbol{t})]$的每一列中只有一个子块不为零，第 j 列中的非零子块位于第 l 行，它等于

$$B^{(\boldsymbol{k},\nu)}_{lj}[(\alpha|\boldsymbol{t})]=A^{(\boldsymbol{k},\nu)}[(\gamma|\boldsymbol{\tau})]=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\tau}}D^{(\nu)}[(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))'] \tag{43.60}$$

对给定的$(\alpha|\boldsymbol{t})$和 j， l 和$(\gamma|\boldsymbol{\tau})\in G(\boldsymbol{k})$由

$$(\alpha|\boldsymbol{t})(\alpha_j|\boldsymbol{v}(\alpha_j))=(\alpha_l|\boldsymbol{v}(\alpha_l))(\gamma|\boldsymbol{\tau}) \tag{43.61}$$

确定。

当$(\alpha|\boldsymbol{t})=(\varepsilon|\boldsymbol{n})$时，(43.61)为

$$(\varepsilon|\boldsymbol{n})(\alpha_j|\boldsymbol{v}(\alpha_j))=(\alpha_j|\boldsymbol{v}(\alpha_j))(\varepsilon|\alpha_j^{-1}\boldsymbol{n})$$

而

$$A^{(\boldsymbol{k},\nu)}[(\varepsilon|\alpha_j^{-1}\boldsymbol{n})]=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\alpha_j^{-1}\boldsymbol{n}}I^{(\nu)}=e^{i\alpha_j\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}I^{(\nu)}$$

从而有

$$B^{(\boldsymbol{k},\nu)}[(\varepsilon|\boldsymbol{n})]=\begin{pmatrix} e^{i\alpha_1\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}I^{(\nu)} & & & 0 \\ & e^{i\alpha_2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}I^{(\nu)} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & e^{i\alpha_q\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}I^{(\nu)} \end{pmatrix} \tag{43.62}$$

其中 $I^{(\nu)}$为 n_ν 阶单位矩阵。

空间群G的任意元总可写为$(\varepsilon|\boldsymbol{n})(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))$的形状，即$G$可由子群$H$和子集$\{(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))：\alpha\in G_0\}$来生成。因而，$G$的不

可约表示的矩阵$B^{(k,\nu)}$只需对元$(\varepsilon|\boldsymbol{n})\in H$和$(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))$ $(\alpha\in G_0)$写出。由于$B^{(k,\nu)}[(\varepsilon|\boldsymbol{n})]$已由(43.62)统一地给出，实际上要作出的矩阵只有$B^{(k,\nu)}[(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))]$，而$\alpha$可限于点群$G_0$的生成元。

当$(\alpha|\boldsymbol{t})=(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))$时，(43.61)可写为

$$(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))(\alpha_j|\boldsymbol{v}(\alpha_j))=(\alpha_l|\boldsymbol{v}(\alpha_l))(\alpha_l^{-1}\alpha\alpha_j|\alpha_l^{-1}\boldsymbol{v}(\alpha)+\alpha_l^{-1}\alpha\boldsymbol{v}(\alpha_j)-\alpha_l^{-1}\boldsymbol{v}(\alpha_l))=(\alpha_l|\boldsymbol{v}(\alpha_l))(\gamma|\boldsymbol{\tau})$$

将上式中的γ和τ代入(36.60)，得

$$B^{(k,\nu)}_{lj}[(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))]=\begin{cases}e^{i\alpha_l\boldsymbol{k}\cdot[\boldsymbol{v}(\alpha)+\alpha\boldsymbol{v}(\alpha_j)-\boldsymbol{v}(\alpha_l)]}D^{(\nu)}[(\alpha_l^{-1}\alpha\cdot\alpha_j|\boldsymbol{v}(\alpha_l^{-1}\alpha\alpha_j))'], & \text{当}\alpha_l^{-1}\alpha\alpha_j\in G_0(\boldsymbol{k})\\ 0, & \text{当}\alpha_l^{-1}\alpha\alpha_j\overline{\in}G_0(\boldsymbol{k})\end{cases}\tag{43.63}$$

(43.62)和(43.63)给出了表示$B^{(k,\nu)}$的标准矩阵的明显表达式。

由布里渊区中的不同波矢引出的G的表示$B^{(k,\nu)}$可能是彼此等价的。首先，由波矢群的定义，有

$$G(\gamma\boldsymbol{k}+\boldsymbol{m})=G(\boldsymbol{k}),\ \gamma\in G_0(\boldsymbol{k})\tag{43.64}$$

所以由$\boldsymbol{k}$和$\boldsymbol{k}'=\gamma\boldsymbol{k}+\boldsymbol{m}(\gamma G_0(\boldsymbol{k}))$所引出的$G$的表示是相同的

$$B^{(k',\nu)}=B^{(k,\nu)},\ \boldsymbol{k}'=\gamma\boldsymbol{k}+\boldsymbol{m},\ \gamma\in G_0(\boldsymbol{k})\tag{43.65}$$

可以进一步证明，对所有$\alpha\in G_0(\boldsymbol{k})$，$B^{(\alpha k,\nu)}$与$B^{(k,\nu)}$等价。为此，我们利用诱导表示的特征标公式(42.15)。将$A^{(k,\nu)}$和$B^{(k,\nu)}$的特征标分别记作$\mu^{(k,\nu)}$和$\chi^{(k,\nu)}$，则有

$$\chi^{(k,\nu)}(g)=\frac{1}{N(G(\boldsymbol{k}))}\sum_{\substack{s\in G\\(s^{-1}gs\in G(\boldsymbol{k}))}}\mu^{(k,\nu)}(s^{-1}gs)\tag{43.66}$$

由波矢群的定义以及

$$G_0(\alpha\boldsymbol{k})=\alpha G_0(\boldsymbol{k})\alpha^{-1}\cong G_0(\boldsymbol{k}),\ \alpha\in G_0\ \ ((41.25))$$

可知

$$G(a\boldsymbol{k})=(a\,|\boldsymbol{v}(a))G(\boldsymbol{k})(a\,|\boldsymbol{v}(a))^{-1}\cong G(\boldsymbol{k}),\quad a\in G_0 \tag{43.67}$$

由此可写

$$\begin{cases}A^{(\boldsymbol{k},\nu)}(g)=A^{(a\boldsymbol{k},\nu)}(g_a g g_a^{-1}),\quad g\in G(\boldsymbol{k})\\ g_a=(a\,|\boldsymbol{v}(a))\end{cases} \tag{43.68}$$

相应地有

$$\mu^{(\boldsymbol{k},\nu)}(g)=\mu^{(a\boldsymbol{k},\nu)}(g_a g g_a^{-1}),\quad g\in G(\boldsymbol{k}) \tag{43.69}$$

从而推知

$$\begin{aligned}&\sum_{\substack{s\in G\\(s^{-1}gs\in G(\boldsymbol{k}))}}\mu^{(\boldsymbol{k},\nu)}(s^{-1}gs)\\ =&\sum_{\substack{s\in G\\(s^{-1}gs\in G(\boldsymbol{k}))}}\mu^{(a\boldsymbol{k},\nu)}(g_a s^{-1}gs\cdot g_a^{-1})\\ =&\sum_{\substack{p\in G\\(p^{-1}gp\in G(a\boldsymbol{k}))}}\mu^{(a\boldsymbol{k},\nu)}(p^{-1}gp)\end{aligned}$$

其中 $p=sg_a^{-1}$，并用到 $g_aG(\boldsymbol{k})g_a^{-1}=G(a\boldsymbol{k})$. 再注意由(43.67)有

$$N(G(\boldsymbol{k}))=N(G(a\boldsymbol{k}))$$

便可由(43.66)得出

$$\chi^{(a\boldsymbol{k},\nu)}(g)=\chi^{(\boldsymbol{k},\nu)}(g) \tag{43.70}$$

或

$$B^{(a\boldsymbol{k},\nu)}\sim B^{(\boldsymbol{k},\nu)},\quad a\in G_0 \tag{43.71}$$

总之，有等价关系

$$B^{(a\boldsymbol{k}+m,\nu)}\sim B^{(\boldsymbol{k},\nu)},\quad a\in G_0 \tag{43.72}$$

所以，为了得到空间群的所有不等价的不可约表示，只需令 $B^{(\boldsymbol{k},\nu)}$ 中的 $\boldsymbol{k}$ 跑遍布里渊的一个基本区。

43.5 例：空间群 O_h^3 的表示

空间群O_h^3的国际符号为 $P\frac{4_2}{m}\bar{3}\frac{2}{n}$，它的点群为 $O_h\left(\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}\right)$，

具有简单立方点阵。点群$\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$有六个 2 次轴、四个 3 次轴、三个 4 次轴，有一个反演中心，有九个垂直于偶次轴的映面。将格矢的基取为基本立方体的棱矢($\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$，$\boldsymbol{c}$)，分别沿三个 4 次轴的方向，长度相等。旋转$\frac{2\pi}{n}$角的操作仍以C_n表示，但为了标明转轴的方向，在C的右上角注以x，$x\bar{y}$，xyz等：x表示转轴沿$\boldsymbol{a}$，$x\bar{y}$表示转轴沿($\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}$)，$xyz$表示转轴沿($\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c}$)，等等。$O_h$的 48 个元都可用这些旋转以及旋转反演（反演以$i$表示）给出，反演中心是 48 个操作的公共不动点。

O_h的生成元可取为C_4^z，C_3^{xyz}，i，它们在简单空间群$P\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$中的对应元为$(C_4^3|0)$，$(C_3^{xyz}|0)$，$(i|0)$．考虑用 4 次螺旋轴来取代4次转轴所生成的非简单空间群，其中必含有操作$(C_4^3|\boldsymbol{v})(\boldsymbol{v}\neq 0)$．此外，在非简单空间群中，所有形如$(\alpha|0)$的操作显然形成一子群，且与$G_0$的一个子群同构。因而存在两种可能的引伸，其生成元分别为$\{(C_4^z|\boldsymbol{v})$，$(C_3^{xyz}|0)$，$(i|0)\}$和$\{(C_4^z|\boldsymbol{v})$，$(C_3^{xyz}|0)$，$(i|\boldsymbol{v})\}$，$\boldsymbol{v}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})$。在前一情形下，$\{(\alpha|0)\}$型的子群为（同构于）$T_h$（由诸$(C_3^{xyz}|0)$和$(i|0)$生成），所生成的空间群为$P\frac{4_2}{m}\bar{3}\frac{2}{n}$；在后一情形下，$\{(\alpha|0)\}$型的子群为$T$（由诸$(C_3^{xyz}|0)$生成），所生成的空间群为$P\frac{4_2}{n}\bar{3}\frac{2}{m}$。其中$\boldsymbol{v}$的取值容易由上述条件及空间操作的乘法规则推出。

总之，空间群O_h^3的生成元可取为

$$(C_4^z|\boldsymbol{v}),\ (C_3^{xyz}|0),\ (i|0),\quad \boldsymbol{v}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c}) \tag{43.73}$$

由此可写出 O_h^3 的所有$(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))$型的元

$$(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))=\begin{cases}(\alpha|0),\ 当\ \alpha\in T_h & (24个)\\(\alpha|\boldsymbol{v}),\ 当\ \alpha\in C_4^z T_h & (24个)\end{cases} \tag{43.74}$$

注意

$$O_h=T_h\cup C_4^z T_h \tag{43.75}$$

是 O_h 按子群 T_h 的左陪集分解。特别地，如取 $\alpha=C_4^z C_3^{xyz} i=C_2^{yz} i=\sigma^{yz}$，可知 O_h^3 中含有操作$(\sigma^{yz}|\boldsymbol{v})$，从而也含有操作

$$(\sigma^{yz}|\boldsymbol{v}-\boldsymbol{c})=\left(\sigma^{yz}\middle|\frac{1}{2}(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}-\boldsymbol{c})\right)$$

这是一个滑移反映，映面法线为 2 次轴$(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})$，滑移矢量为 $\frac{1}{2}(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}-\boldsymbol{c})$。这种滑移反映在 O_h^3 的国际符号 $P\frac{4_2}{m}\bar{3}\frac{2}{n}$中，是由 n 来表现的。而$(C_4^z|\boldsymbol{v})$则是由 4_2 表现的。注意$(C_4^z|\boldsymbol{v})$的螺旋位移是$\frac{1}{2}\boldsymbol{c}$；$\boldsymbol{v}$中的垂直分量 $\frac{1}{2}(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})$表示这个螺旋旋转的轴不过原点，而通过点$\frac{\boldsymbol{b}}{2}$，即相对于 C_4^z 的轴有 $\frac{\boldsymbol{b}}{2}$ 的平行位移。

为了作出 O_h^3 的所有不可约表示，需要考虑简单立方点阵的布里渊区的一个基本区（见 41.3 节的图）上的波矢。这个基本区取为以Γ、R、M、X为顶点的四面体，除了面 RMX 上的点之外，其余的点都在布里渊区的内部。而在面 RMX上的点，除了R、M、X、T、S 这五个点波矢群含有$(\alpha|\boldsymbol{v})$ 型的元以外，其余点上的波矢群只含$(\alpha|0)$型的元（基本平移除外）。例如，这个面上的一般点的 $G_0(\boldsymbol{k})=\{I,\ \sigma^y\}\cong C_s$（见(41.28)），但 $\sigma^y\in T_h$，由(43.74)可知，与 σ^y 相关的$G(\boldsymbol{k})$

的元为$(\sigma^{y}|0)$。再如，Z点的$G_0(\boldsymbol{k})$为$G_0(Z)=\{I, C_2^x, \sigma^y, \sigma^z\}\cong C_{2v}$（见(41.36)），这个点群显然是(43.74)中的T_h的子群，故相应的$G(\boldsymbol{k})=G(Z)$的元为$(\alpha|0)$。但点S的情形不同，虽然有$G_0(S)=\{I, C_2^{xz}, \sigma^y, \sigma^{x\bar{z}}\}\cong C_{2v}$(见(41.37))，可是$C_2^{xz}$与$\sigma^{x\bar{z}}$并不属于(43.74)中的$T_h$，故在$G(S)$中的相应元为$(C_2^{xz}|\boldsymbol{v})$和$(\sigma^{x\bar{y}}|\boldsymbol{v})$。总之，除了$R$、$M$、$X$、$T$、$S$这五个点外，由基本区的每个波矢所产生的$O_h^3$的不可约表示，都可通过相应波矢点群的已知不可约表示直接写出；而对于这五个点，则必须先作出波矢点群的二次覆盖群G_k的表示$\left(\boldsymbol{v}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})\text{决定了(43.41)中的}l=2\right)$.

例 1　一般点

这时$\boldsymbol{k}$跑遍基本区四面体的内部。由(41.26)知$G_0(\boldsymbol{k})=\{I\}$，从而$G(\boldsymbol{k})=H=\{(\varepsilon|\boldsymbol{n})\}$，$\{\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_g\}=O_h$. $G_0(\boldsymbol{k})$的唯一不可约表示是$D^{(\nu)}=1$，代入(43.63)，并将α_i和α_j分别记为β和γ，再注意$\boldsymbol{v}(\alpha\gamma)=\boldsymbol{v}(\gamma)+\alpha\boldsymbol{v}(\gamma)$，则(43.63)化为

$$B_{\beta\gamma}^{(k)}[(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))]=\begin{cases}1, & \text{当 } \beta=\alpha\gamma \\ 0, & \text{当 } \beta\neq\alpha\gamma\end{cases} \tag{43.76}$$

其中β和γ跑遍O_h，故$B^{(k)}[(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))]$是$N(O_h)=48$阶矩阵。这时的(43.62)为

$$B_{\beta\gamma}^{(k)}[(\varepsilon|\boldsymbol{n})]=\delta_{\beta\gamma}e^{i\beta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}} \tag{43.77}$$

或将以上两式合并写为

$$B_{\beta\gamma}^{(k)}[\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha)+\boldsymbol{n})]=\delta_{\beta,\alpha\gamma}e^{i\beta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}} \tag{43.78}$$

这些表示都是48维的。

例 2　Λ点

$G_0(\Lambda)=\{I, C_3^{xyz}, C_3^{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}, \sigma^{y\bar{z}}, \sigma^{x\bar{z}}, \sigma^{x\bar{y}}\}\cong C_{3v}$(见(41.30)式)，或写为 $G_0(\Lambda)=\{I, C_3^{xyz}, C_3^{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}, iC_2^{y\bar{z}}, iC_2^{x\bar{z}}, iC_2^{x\bar{y}}\}$.
$G_0=O_h$ 按 $G_0(\Lambda)$的左陪集分解的代表元可取为：

$$
\begin{aligned}
&\{\alpha_1,\ \alpha_2,\ \alpha_3,\ \alpha_4,\ \alpha_5,\ \alpha_6,\ \alpha_7,\ ,\ \alpha_8\}\\
&=\{I,\ C_2^x,\ C_2^y,\ C_2^z,\ i,\ iC_2^x,\ iC_2^y,\ iC_2^z\}\\
&=D_{2h} \qquad (43.79)
\end{aligned}
$$

因Λ在布里渊区的内部，有 $D^{(\nu)}[(\gamma\,|v(\gamma))']=D^{(\nu)}(\gamma)$；又 $\alpha_i\in T_h(i=1,2,\cdots,8)$由(43.74)有 $v(\alpha_i)=0\ (i=1,2,\cdots,8)$；再注意 $\alpha_i^{-1}=\alpha_i$，可将(43.63)写为

$$
B_{lj}^{(k,\nu)}[(\alpha\,|v(\alpha))]=\begin{cases} e^{i\alpha_l k\cdot v(\alpha)}D^{(\nu)}(\alpha_l\alpha\alpha_j), & \text{当}\ \alpha_l\alpha\alpha_j\in G_0(\Lambda)\\ 0, & \text{当}\ \alpha_l\alpha\alpha_j\overline{\in} G_0(\Lambda)\end{cases} \qquad (43.80)
$$

其中 $D^{(\nu)}$为 $G_0(\Lambda)\cong C_{3v}$ 的不可约表示，两个一维的($D^{(1)}$和 $D^{(2)}$)，一个2维的($D^{(3)}$)，均已在15.3给出。

矩阵(43.80)只需对 O_h^3 的生成元$(C_4^z\,|v)$，$(C_3^{xyz}\,|0)$和$(i\,|0)$具体写出。由 O_h 的乘法表不难算出，矩阵 $B^{(k,\nu)}[(C_4^z\,|v)]$，$B^{(k,\nu)}[(C_3^{xyz}\,|0)]$和 $B^{(k,\nu)}[(i\,|0)]$的非零子块，其结果为

$$
\begin{cases} B_{lj}^{(k,\nu)}[(C_4^z\,|v)]=e^{in_l\pi k/\sqrt{8}}D^{(\nu)}(\sigma^{x\bar{y}})\\ (lj)=(17),(25),(38),(46),(53),(61),(74),(82)\\ n_1=3, n_2=n_3=n_4=-1, n_5=-3, n_6=n_7=n_8=2\end{cases} \qquad (43.81)
$$

$$
\begin{cases} B_{lj}^{(k,\nu)}[(C_3^{xyz}\,|0)]=D^{(\nu)}(C_3^{xyz})\\ (lj)=(11),(24),(32),(43),(55),(68),(76),(87)\end{cases} \qquad (43.82)
$$

$$
\begin{cases} B_{lj}^{(k,\nu)}[(i\,|0)]=D^{(\nu)}(I)\\ (lj)=(15),(26),(37),(48),(51),(62),(73),(84)\end{cases} \qquad (43.83)
$$

其中

$$D^{(1)}(I)=D^{(1)}(C_3^{xyz})=D^{(1)}(\sigma^{x\bar{y}})=1 \qquad (43.84)$$

$$D^{(2)}(I)=D^{(2)}(C_3^{xyz})=1, D^{(2)}(\sigma^{x\bar{y}})=-1 \quad (43.85)$$

$$D^{(3)}(I)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\ D^{(3)}(C_3^{xyz})=\begin{pmatrix}e^{2\pi i/3} & 0\\ 0 & e^{4\pi i/3}\end{pmatrix},$$

$$D^{(3)}(\sigma^{x\bar{y}})=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} \qquad (43.86)$$

可见表示 $B^{(k,1)}$，$B^{(k,2)}$ 和 $B^{(k,3)}$ 的维数分别为：8，8 和16. $\boldsymbol{k}$ 的变化范围是

$$\begin{cases}\boldsymbol{k}=k_x\tilde{\boldsymbol{a}}+k_y\tilde{\boldsymbol{b}}+k_z\tilde{\boldsymbol{c}}=k(\tilde{\boldsymbol{a}}+\tilde{\boldsymbol{b}}+\tilde{\boldsymbol{c}})/\sqrt{3}\\ 0<k<\sqrt{3}/2\end{cases} \qquad (43.87)$$

例 8　S 点

$G_0(S)=\{I, C_2^{\bar{x}z}, \sigma^y, \sigma^{xz}\}=\{I, C_2^{\bar{x}y}, iC_2^y, iC_2^{\bar{x}z}\}\cong C_{2v}$

$G_0(S)$在 O_h 中的左陪集之代表元可取为

$$\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \alpha_6, \alpha_7, \alpha_8, \alpha_9, \alpha_{10}, \alpha_{11}, \alpha_{12}\}$$
$$=\{I, C_2^x, C_2^y, C_2^z, C_3^{xyz}, C_3^{xy\bar{z}}, C_3^{x\bar{y}z}, C_3^{\bar{x}yz}, C_3^{\bar{x}y\bar{z}}, C_3^{\bar{x}\bar{y}z}, C_3^{x\bar{y}\bar{z}},$$
$$C_3^{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}\}=T \qquad (43.88)$$

注意到 $T\subset T_h$，由(43.74)知

$$v(\alpha_l)=0,\ l=1,2,\cdots,12 \qquad (43.89)$$

将上式以及 $v(C_3^{xyz})=v(i)=0$，$v(C_4^z)=\frac{1}{2}(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})$（见(43.73)）代入式(43.63)，并利用 O_h 的乘法表，可算出由 S 点的波矢所产生的 O_h^3 的不可约表示矩阵$B^{(k,\nu)}$对于生成元的值，其非零子块为

$$\begin{cases} B_{lj}^{(k;\nu)}[(C_4^z|v)] = e^{i\pi(n_l k' + \delta_l/2)} D^{(\nu)}(g_{C_2^{\bar{x}z}}^{(0)}) \\ (l,j)=(1,7),(2,6),(3,8),(4,12),(5,10),(6,3) \\ \qquad (7,4),(8,2),(9,11),(10,9),(11,5),(12,1) \\ (n_l,\delta_l) = \begin{cases} (2,1), & l=1,5,12 \\ (0,-1), & l=2,4,7,8,10,11 \\ (-2,1), & l=3,6,9 \end{cases} \end{cases} \tag{43.90}$$

$$\begin{cases} B_{lj}^{(k;\nu)}[(C_3^{\bar{x}yz}|0)] = D^{(\nu)}(g_I^{(0)}) \\ (l,j)=(1,12),(2,7),(3,6),(4,8),(5,1),(6,9) \\ \qquad (7,11),(8,10),(9,3),(10,4),(11,2),(12,5) \end{cases} \tag{43.91}$$

$$\begin{cases} B_{lj}^{(k;\nu)}[(i|0)] = D^{(\nu)}(g_{\sigma^y}^{(0)}) \\ (l,j)=(1,3),(2,4),(3,1),(4,2),(5,9),(6,12) \\ \qquad (7,8),(8,7),(9,5),(10,11),(11,10),(12,6) \end{cases} \tag{43.92}$$

其中 $D^{(\nu)}$是 $G_0(S)$的二次覆盖群 G_S 的不可约表示；$\boldsymbol{k}$ 的取值范围是

$$\begin{cases} \boldsymbol{k} = k_x\tilde{\boldsymbol{a}} + k_y\tilde{\boldsymbol{b}} + k_z = k'(\tilde{\boldsymbol{a}} + \tilde{\boldsymbol{c}}) + \frac{1}{2}\tilde{\boldsymbol{b}} \\ 0 < k' < \frac{1}{2} \end{cases} \tag{43.93}$$

G_S 是个 8 阶群

$$G_S = \{g_I^{(0)},\ g_{C_2^{\bar{x}z}}^{(0)},\ g_{\sigma^y}^{(0)},\ g_{\sigma^{x\bar{z}}}^{(0)},\ g_I^{(1)},\ g_{C_2^{\bar{x}z}}^{(1)},\ g_{\sigma^y}^{(0)},\ g_{\sigma^{x\bar{z}}}^{(1)}\}$$

$$= \{g_1^{(0)},\ g_2^{(0)},\ g_3^{(0)},\ g_4^{(0)},\ g_1^{(1)},\ g_2^{(1)}, g_3^{(1)}, g_4^{(1)}\} \tag{43.94}$$

由(43.32)和(43.74)可知

$$\boldsymbol{m}(I)=0,\ \boldsymbol{m}(C_2^{\bar{x}z}) = -\tilde{\boldsymbol{b}},\ \boldsymbol{m}(\sigma^y) = -\tilde{\boldsymbol{b}},\ \boldsymbol{m}(\sigma^{x\bar{z}})=0$$

$$\boldsymbol{v}(I)=0,\ \boldsymbol{v}(C_2^{\bar{x}z})=\boldsymbol{v},\ \boldsymbol{v}(\sigma^y)=0,\ \boldsymbol{v}(\sigma^{x\bar{z}})=\boldsymbol{v} \tag{43.95}$$

代入(43.34)可算出扩展因子$\eta(\gamma_1,\gamma_2)$的值

η	I	C_2^{xz}	σ^y	$\sigma^{x\bar{z}}$
I	1	1	1	1
C_2^{xz}	1	−1	1	−1
σ^y	1	−1	1	−1
$\sigma^{x\bar{z}}$	1	1	1	1

(43.96)

又4阶阿贝尔群$G_0(S)$有乘法表

$G_0(S)$	I	C_2^{xz}	σ^y	$\sigma^{x\bar{z}}$
I	I	C_2^{xz}	σ^y	$\sigma^{x\bar{z}}$
C_2^{xz}	C_2^{xz}	I	$\sigma^{x\bar{z}}$	σ^y
σ^y	σ^y	$\sigma^{x\bar{z}}$	I	C_2^{xz}
$\sigma^{x\bar{z}}$	$\sigma^{x\bar{z}}$	σ^y	C_2^{xz}	I

(43.97)

从而，由(43.42)可写出G_S的部分乘法表

G_S	$g_1^{(0)}$	$g_2^{(0)}$	$g_3^{(0)}$	$g_4^{(0)}$
$g_1^{(0)}$	$g_1^{(0)}$	$g_2^{(0)}$	$g_3^{(0)}$	$g_4^{(0)}$
$g_2^{(0)}$	$g_2^{(0)}$	$g_1^{(1)}$	$g_4^{(0)}$	$g_3^{(1)}$
$g_3^{(0)}$	$g_3^{(0)}$	$g_4^{(1)}$	$g_1^{(0)}$	$g_2^{(1)}$
$g_4^{(0)}$	$g_4^{(0)}$	$g_3^{(0)}$	$g_2^{(0)}$	$g_1^{(0)}$

(43.98)

乘法表的其余部分可由(43.45)和(43.46)写出。

利用乘法表或直接使用(43.53)，容易作出G_S的共轭元素类，结果为

$$G_S=\{g_1^{(0)};\ g_1^{(1)};\ g_2^{(0)},g_2^{(1)};\ g_3^{(0)},g_3^{(1)};\ g_4^{(0)},g_4^{(1)}\} \tag{43.99}$$

共有5个类。由此可知，G_S有5个不可约表示，且其维数$n_1\leqslant n_2\leqslant n_3\leqslant n_4\leqslant n_5$满足方程

$$n_1^2+n_2^2+n_3^2+n_4^2+n_5^2=8$$

唯一的解为

$$n_1=n_2=n_3=n_4=1$$

$$n_5=2$$

进一步可用 17.4 节的简单方法计算出这 5 个不可约表示。事实上由乘法表不难看出，G_8 与点群 D_4 同构，即有

$$\{g_1^{(0)},\ g_1^{(1)},\ g_2^{(0)},\ g_2^{(1)},\ g_3^{(0)},\ g_3^{(1)},\ g_4^{(0)},\ g_4^{(1)}\}$$
$$\cong\{I,\ C_4^2,\ C_4,\ C_4^3,\ C_2^{(1)},\ C_2^{(2)},\ C_{2d}^{(1)},\ C_{2d}^{(2)}\} \qquad (43.100)$$

在这个写法中同时给出了群元之间的同构对应：出现的次序相同的元是相互对应的。由此，不必重新计算，可以直接引用 19.2 节中的关于点群 D_4 的不可约表示的已知结果。于是得到 G_8 的不可约表示的完整表

G_8	$g_1^{(0)}$	$g_1^{(1)}$	$g_2^{(0)}$	$g_2^{(1)}$	$g_3^{(0)}$	$g_3^{(1)}$	$g_4^{(0)}$	$g_4^{(1)}$
$D^{(1)}$	1	1	1	1	1	1	1	1
$D^{(2)}$	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1
$D^{(3)}$	1	1	−1	−1	1	1	−1	−1
$D^{(4)}$	1	1	−1	−1	−1	−1	1	1
$D^{(5)}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1\\-1&0\end{pmatrix}$

将这些表示在 $g_2^{(0)}=g^{(0)}_{C_2^{xz}}$，$g_1^{(0)}=g_I^{(0)}$ 和 $g_3^{(0)}=g_{\sigma y}^{(0)}$ 处的值分别代入(43.90)，(43.91)和(43.92)，便得到 O_h^3 的不可约表示矩阵元的具体数值。我们看到，表示 $B^{(k,1)}$，$B^{(k,2)}$，$B^{(k,3)}$，和$B^{(k,4)}$都是 12 维的；而 $B^{(k,5)}$是 24 维的。

以上我们以三类有代表性的点为例，说明了如何由布里渊区的任意波矢生成空间群 O_h^3 的不可约表示。当 $\boldsymbol{k}$ 取遍以 R、M、X、Γ 为顶点的四面体（基本区）时，便将得出 O_h^3 的不可约表示的完整表。

最后我们指出，可以用公式(43.66)来计算空间群的单纯特征标。事实上，由(43.26)，可将波矢群$G(\boldsymbol{k})$的单纯特征标进一步写为

$$\mu^{(k,\nu)}[(\gamma\,|\boldsymbol{\tau})]=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\tau}}\chi^{(\nu)}(g_\gamma^{(0)}) \qquad (43.101)$$

其中 $\chi^{(\nu)}$是 $G_0(\boldsymbol{k})$的覆盖群 G_k 的单纯特征标。当 $\boldsymbol{k}$ 在布里渊区的内部，或者 $\boldsymbol{k}$ 在布里渊区的边界上但$\boldsymbol{v}(\gamma)=0(\gamma\in G_0(\boldsymbol{k}))$时，(43.101)退化为

$$\mu^{(\boldsymbol{k},\nu)}[(\gamma|\boldsymbol{\tau})]=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\tau}}\chi^{(\nu)}(\gamma) \tag{43.102}$$

其中 $\chi^{(\nu)}(\gamma)$是 $G_0(\boldsymbol{k})$的单纯特征标。以上两式中的$(\gamma|\boldsymbol{\tau})$均表波矢群$G(\boldsymbol{k})$的一般元。

例如，$G(S)$的 $\mu^{(\boldsymbol{k},\nu)}[(\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma))]$值为

$G(S)$	I	C_2^{xz}	σ^y	$\sigma^{x\bar{z}}$
$\mu^{(k,1)}$	1	$e^{ik\cdot v}$	1	$e^{ik\cdot v}$
$\mu^{(k,2)}$	1	$e^{ik\cdot v}$	-1	$-e^{ik\cdot v}$
$\mu^{(k,3)}$	1	$-e^{ik\cdot v}$	1	$-e^{ik\cdot v}$
$\mu^{(k,4)}$	1	$-e^{ik\cdot v}$	-1	$e^{ik\cdot v}$
$\mu^{(k,5)}$	2	0	0	0

$$k\cdot v=\pi\left(2k'+\frac{1}{2}\right)$$

$$0<k'<\frac{1}{2}$$

§44 晶体中的电子态

44.1 晶体中电子态的分类

与原子和分子的情形相似，对晶体中的电子体系也可先取单电子近似，确定出单电子的定态和能级，然后再由单电子态构成总反对称的多电子态，同时考虑电子间的相互作用的修正。这个步骤完全可以与§40中对原子问题的处理相类比地进行。基础性的工作是将单电子状态按势函数的对称性（即按哈密顿的对称性）进行分类。在原子的情形，势函数具有以原子核为中心的$O(3)$对称性；在分子的情形，势函数具有分子的点群的对称性。对于晶体，这个势函数则具有该晶体的空间群的对称性，这显然比原子、分子的情形复杂得多。但由于已经有了系统的群论方法，这一复杂性所带来的实际麻烦并没有初

看起来那样严重。态的分类问题也就是将态空间按体系的对称群的不可约表示进行约化的问题，现在是要将单电子的态空间按晶体的空间群的不可约表示进行约化(暂不考虑电子自旋)。

分类（约化）可分三步完成，第一步是先按格群H（即按平移对称性）的表示分类。由(20.5)和(41.2)可写出H的投影算子

$$\hat{p}^{(k)}=\frac{1}{N(H)}\sum_{n}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}(\varepsilon|\boldsymbol{n}) \tag{44.1}$$

其中$(\varepsilon|\boldsymbol{n})$表平移算子

$$(\varepsilon|\boldsymbol{n})\psi(\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{n}) \tag{44.2}$$

为了简化记号，我们仍约定，空间群的操作的符号同时用来表示作用于态空间上的对应算子。两种意义可以从它是作用于$\boldsymbol{r}$还是作用ψ来区分。用$\hat{p}^{(k)}$作用于态空间$\mathscr{V}$的所有波函数（或一组基矢），得到的非零函数的集合$\{\hat{p}^{(k)}\psi\}$张成一线性空间$\mathscr{V}_k$，$\mathscr{V}_k$便是具有同一平移对称性$A^{(k)}$的态所张成的空间。事实上易验证

$$(\varepsilon|\boldsymbol{n})\psi_k(\boldsymbol{r})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}\psi_k(\boldsymbol{r}),\quad \psi_k\in\mathscr{V}_k \tag{44.3}$$

这也可由更一般的算子等式（(20.14)的特例）

$$\begin{aligned}(\varepsilon|\boldsymbol{n})\hat{p}^{(k)}&=\frac{1}{N(H)}\sum_{n'}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}'}(\varepsilon|\boldsymbol{n}'+\boldsymbol{n})\\&=\frac{1}{N(H)}\sum_{n''}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{n}''-\boldsymbol{n})}(\varepsilon|\boldsymbol{n}'')\\&=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}\hat{p}^{(k)}\end{aligned} \tag{44.4}$$

看出。由(44.3)知，$\psi_k(\boldsymbol{r})$可以写为

$$\begin{cases}\psi_k(\boldsymbol{r})=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}w(\boldsymbol{r})\\w(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{n})=w(\boldsymbol{r})\end{cases} \tag{44.5}$$

其中w是$\boldsymbol{r}$的周期函数，周期与晶格的周期相同，亦即在H下

不变（或有平移对称性 $A^{(0)}$）的函数。$\psi_k(\boldsymbol{r})$通常称为布洛赫(Bloch)函数。

分类的第二步，是进一步将$\mathscr{V}_k$中的态按波矢群$G(\boldsymbol{k})$的表示分类。显然，$\mathscr{V}_k$在$G(\boldsymbol{k})$下不变，因而形成$G(\boldsymbol{k})$的表示空间，并可按$G(\boldsymbol{k})$的表示约化（一般是可约的）。在43.2节中已经证明，一个空间在$G(\boldsymbol{k})$下不可约的充要条件是，它在$G_0(\boldsymbol{k})$或G_k下（即在(43.25)下)不可约。因而，只需将$\mathscr{V}_k$按$G_0(\boldsymbol{k})$或G_k的表示约化，但$G_0(\boldsymbol{k})$的元γ或G_k的元$g_\gamma^{(m)}$所对应的$\mathscr{V}_k$上的算子分别为$(\gamma|v(\gamma))'$或$e^{2\pi i m/l}(\gamma|v(\gamma))'$。因$G_0(\boldsymbol{k})$或$G_k$的不可约表示的矩阵是已知的，可以作出相应的（广义）投影算子，故可用投影算子方法将$\mathscr{V}_k$约化。这样作出的$G_0(\boldsymbol{k})$或G_k的$D^{(\nu)}$不可约基

$$\psi_{k,1}^{(\nu)},\ \psi_{k,2}^{(\nu)},\cdots,\psi_{k,n_\nu}^{(\nu)} \tag{44.6}$$

亦即$G(\boldsymbol{k})$的$A^{(k,\nu)}$不可约基（见(43.26)），这组矢量同时具有平移对称性$A^{(k)}$和$G(\boldsymbol{k})$对称性$A^{(k,\nu)}$。当然，$A^{(k,\nu)}$在$\mathscr{V}_k$的约化中可能出现不只一次，(44.6）是其中的一个代表。

第三步，令$\{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_q\}$为$G_0(\boldsymbol{k})$在$G_0$（空间群$G$的点群）中的左陪集的代表元($\alpha_1=\varepsilon$)，将$(\alpha_i|v(\alpha_i))(i=1,2,\cdots,q)$作用于基(44.6)，得（见(43.58)）

$$\begin{cases}\psi_{k,ij}^{(\nu)}=(\alpha_j|v(\alpha_j))\psi_{k,i}^{(\nu)}\\ i=1,2,\cdots,n_\nu;\quad j=1,2,\cdots,q\end{cases} \tag{44.7}$$

这就是G的按不可约表示$B^{(k,\nu)}$变换的不可约基(见(43.59))。注意(44.7)中的函数的平移对称性是不同的：j相同的函数具有同一平移对称性$A^{(\alpha_j k)}$，共有q种不同的平移对称性。事实上，$\{\psi_{k,1j}^{(\nu)},\psi_{k,2j}^{(\nu)},\cdots,\psi_{k,n_\nu j}^{(\nu)}\}$是空间$\mathscr{V}_{\alpha_j k}$中的一组按$G(\alpha_j\boldsymbol{k})$的表示$A^{(\alpha_j k,\nu)}$变换的不可约基（见(42.8)式）。

因$\mathscr{V}$在G下不变，故若$\mathscr{V}$含有$\mathscr{V}_k$，它也必含有

$$\mathscr{V}_{\alpha_l k}=(\alpha_l|v(\alpha_l))\mathscr{V}_k \tag{(43.16)}$$

反之亦然。因而，在$\mathscr{V}$的第一步约化（按H）中，q个子空间$\mathscr{V}_{\alpha_l k}(l=1,2,\cdots,q)$是作为整体出现或不出现的；而且幺正算子$(\alpha_l|v(\alpha_l))$定义了$\mathscr{V}_{\alpha_l k}$与$\mathscr{V}_k$之间的一个同构映射，从而这$q$个子空间是同构的。所以，在按$H$约化$\mathscr{V}$时，我们只需作出其$\boldsymbol{k}$值限于一个基本区的子空间$\mathscr{V}_k$，对应于其他$\boldsymbol{k}$值的子空间可以无遗漏地由(43.16)给出。由此推知，若$\{\psi_{k,i}^{(\nu)}\}$中的$\boldsymbol{k}$取遍出现于$\mathscr{V}$中且限于一个基本区的值（(ν)的重复指标假定已含于ψ中），则由(44.7)确定的$\{\psi_{k,ij}^{(\nu)}\}$将张成整个空间$\mathscr{V}$。这时(44.7)给出了空间$\mathscr{V}$的一组$G\supset H$分类基，从而实现了电子态按空间对称性的完全分类。

不可约表示$B^{(k,\nu)}$是幺正的，按正交性定理，不可约基(44.7)对指标$\boldsymbol{k}$，(ν)以及(ij)都是正交的。特别地，电子的晶体中的哈密顿算子$\hat{H}$在这种分类基下的矩阵，关于$\boldsymbol{k}$、(ν)、(ij)都是对角的，因而能量的本征态只能对具有相同指标$(\boldsymbol{k}, \nu, i, j)$的不同的$\psi_{k,ij}^{(\nu)}$进行组合。

44.2 能带

属于同一个不可约表示的所有电子态必须属于同一个能级，因而能级可用对称群的不可约表示来标记（分类）。特别地，晶体中的电子能级可用空间群的不可约表示$B^{(k,\nu)}$来标记，例如记为$E^{(k,\nu)}$. 能量$E^{(k,\nu)}$是$B^{(k,\nu)}$的不可约基的共同本征值，而这些不可约基就是属于能级$E^{(k,\nu)}$的定态波函数。所以$E^{(k,\nu)}$的简并度即是$B^{(k,\nu)}$的维数$q\times n_\nu=\dfrac{N(G)}{N(G(\boldsymbol{k}))}\times n_\nu$，$n_\nu$为$G_0(\boldsymbol{k})$或$G_k$的不可约表示$D^{(\nu)}$的维数。

$E^{(k,\nu)}$是$\boldsymbol{k}$和ν的函数，$\boldsymbol{k}$可在布里渊区中连续地变动，而ν是标记$G_0(\boldsymbol{k})$或G_k的不可约表示的分立变量，因而ν一般是与$\boldsymbol{k}$有关的。在§41中已经表明，整个布里渊区可以分成若干个部分，当$\boldsymbol{k}$在每个部分内变动时，$G_0(\boldsymbol{k})$或G_k是不变

的，因而这时ν具有与$\boldsymbol{k}$无关的意义。例如，对于简单立方点阵的布里渊区，当$\boldsymbol{k}$在一个基本区（以Γ、R、M、X为顶点的四面体）内部变化时，$G_0(\boldsymbol{k})=\{I\}$；当$\boldsymbol{k}$在三角形$RMX$内部变化时，$G_0(\boldsymbol{k})=\{I,\sigma^y\}$；等等。已知群$\{I,\sigma^y\}$有两个不可约表示$D^{(1)}$和$D^{(2)}$($D^{(1)}(g)=1$，$D^{(2)}(g)=\det g$)，考虑由$D^{(2)}$确定的$G$的表示$B^{(k,2)}$，则相应的能级为$E^{(k,2)}$，$\boldsymbol{k}\in$三角形$RMX$的内部。设$\boldsymbol{k}_0$为三角形$RMX$内的任一点，相应的$G_0(\boldsymbol{k}_0)$的$D^{(2)}$不可约基(44.6)为$\psi_{\boldsymbol{k}_0}^{(2)}$（注意$D^{(2)}$是一维的）。作函数$e^{-id\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi_{\boldsymbol{k}_0}^{(2)}(\boldsymbol{r})$，使$d\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_0=\boldsymbol{k}$仍在三角形$RMX$内，则有

$$
\begin{aligned}
(\varepsilon|\boldsymbol{n})[e^{-id\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi_{\boldsymbol{k}_0}^{(2)}(\boldsymbol{r})]&=e^{-id\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{n})}\psi_{\boldsymbol{k}_0}^{(2)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{n})\\
&=e^{-id\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{n})}e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{n}}\psi_{\boldsymbol{k}_0}^{(2)}(\boldsymbol{r})\\
&=e^{i(\boldsymbol{k}_0+d\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{n}}[e^{-id\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi_{\boldsymbol{k}_0}^{(2)}(\boldsymbol{r})]
\end{aligned}
\tag{44.8}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{g}[e^{-id\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi_{\boldsymbol{k}_0}^{(2)}(\boldsymbol{r})]&=e^{-id\boldsymbol{k}\cdot g^{-1}\boldsymbol{r}}\psi_{\boldsymbol{k}_0}^{(2)}(g^{-1}\boldsymbol{r})\\
&=e^{-ig(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r}}\hat{g}\psi_{\boldsymbol{k}_0}^{(2)}(\boldsymbol{r})\\
&=e^{-i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r}}\hat{g}\psi_{\boldsymbol{k}_0}^{(2)}(\boldsymbol{r})\\
&=\det g\cdot[e^{-id\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi_{\boldsymbol{k}_0}^{(2)}(\boldsymbol{r})],\quad g\in G_0(\boldsymbol{k}_0)
\end{aligned}
\tag{44.9}
$$

其中已注意到$g\in G_0(\boldsymbol{k}_0)\Rightarrow e^{-ig\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}}=e^{-i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}}$，以及$g\in G_0(\boldsymbol{k})=G_0(\boldsymbol{k}_0)\Rightarrow e^{-ig\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$。由（44.8）和（44.9）表明，函数$[e^{-id\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi_{\boldsymbol{k}_0}^{(2)}(\boldsymbol{r})]$就是$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_0+d\boldsymbol{k}$点的$D^{(2)}$不可约基。所以，利用定义

$$
\psi_{\boldsymbol{k}_0+d\boldsymbol{k}}^{(2)}(\boldsymbol{r})=e^{-id\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi_{\boldsymbol{k}_0}^{(2)}(\boldsymbol{r})
\tag{44.10}
$$

我们能够从三角形RMX内的任一点$\boldsymbol{k}_0$上的$D^{(2)}$不可约基出发，作出三角形RMX内所有点上的$D^{(2)}$不可约基。显然，这样作出的三角形RMX内点上的$D^{(2)}$不可约基是波矢$\boldsymbol{k}$在三

角形 RMX 内的连续函数。因为能量本征值连续地依赖于本征函数，由此可以推断，$E^{(\boldsymbol{k},2)}$ 是 $\boldsymbol{k}$ 在三角形 RMX 内的连续函数。从上面的分析容易看出，这项结论并不受所取特例的限制。一般地，当 $\boldsymbol{k}$ 限于布里渊区的上述的一个部分之内时，ν 具有与 $\boldsymbol{k}$ 无关的意义，而对于每个 ν，$E^{(\boldsymbol{k},\nu)}$ 是波矢 $\boldsymbol{k}$ 的连续函数。

当 $\boldsymbol{k}$ 由一个部分过渡到另一个相邻的部分时，$G_0(\boldsymbol{k})$ 或 G_k 将随之而变，因而记号 ν 的意义也随之跃变：两个不同群的表示的标记。例如，在上面的例子中，当 $\boldsymbol{k}$ 在三角形 RMX 内时，我们有 $E^{(\boldsymbol{k},1)}$ 和 $E^{(\boldsymbol{k},2)}$；当 $\boldsymbol{k}$ 在基本四面体内时，因 $G_0(\boldsymbol{k})=\{I\}$ 只有一个单位表示 $D^{(1')}$，故只有 $E^{(\boldsymbol{k},1')}$。注意这里的 $D^{(1')}$ 和 $D^{(1)}$ 分别是两个不同的群的单位表示，不能混淆。现在令 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_0+d\boldsymbol{k}$ 在基本四面体内，作函数 $e^{-id\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi^{(2)}_{\boldsymbol{k}_0}(\boldsymbol{r})$，则(44.8)仍然成立。以 $G_0(\boldsymbol{k})=\{I\}$ 的元作用于此函数，因此时的 $G_0(\boldsymbol{k})$ 是 $G_0(\boldsymbol{k}_0)$ 的子群，故(44.9)对子群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 成立 $(e^{-ig\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}},\ g\in G_0(\boldsymbol{k}))$。有：

$$\hat{g}[e^{-id\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi^{(2)}_{\boldsymbol{k}_0}(\boldsymbol{r})]=[e^{-id\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi^{(2)}_{\boldsymbol{k}_0}(\boldsymbol{r})],\quad g\in G_0(\boldsymbol{k}) \tag{44.11}$$

即 $[e^{-id\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi^{(2)}_{\boldsymbol{k}_0}(\boldsymbol{r})]$ 按 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的表示 $D^{(1')}$ 变换。由此可见，函数

$$\varphi^{(1')}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=e^{-id\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi^{(2)}_{\boldsymbol{k}_0}(\boldsymbol{r}) \tag{44.12}$$

为 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_0+d\boldsymbol{k}$ 点上的 $D^{(1')}$ 不可约基。显然有

$$\varphi^{(1')}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\xrightarrow[\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k}_0]{}\psi^{(2)}_{\boldsymbol{k}_0}(\boldsymbol{r}) \tag{44.13}$$

与此相应地，它们所属的能量本征值有

$$E^{(\boldsymbol{k},1')}\xrightarrow[\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k}_0]{}E^{(\boldsymbol{k}_0,2)} \tag{44.14}$$

实际上，由不可约表示 $B^{(\boldsymbol{k},\nu)}$ 标记的能级一般不是唯一的，这时能级还依赖于其他量子数，完整的记法应为 $E^{(\boldsymbol{k},\nu)}_m$，以上讨

论中略去了量子数组 m。(44.14) 表示了一个 $E^{(k,1')}$ 与一个 $E^{(k,2)}$之间的关系，这是由(44.13)确定的；用同样的推理可以得知，有另一个 $E^{(k,1')}$与一个 $E^{(k_0,1)}$满足类似的关系

$$E^{(k,1')}\xrightarrow[k\to k_0]{}E^{(k_0,1)} \tag{44.15}$$

因此，对任一个 $E^{(k,1')}$，总有

$$E^{(k,1')}\xrightarrow[k\to k_0]{}E^{(k_0,1)}\ 或\ E^{(k_0,2)} \tag{44.16}$$

不难将上面的讨论一般化。考虑布里渊区中的两个相邻的部分V和S，S是V的部分边界，例如当V是基本（开）区时，S可以是V的一个面、一个棱或一个顶点；当V是一线段（开）时，S是V的一个端点；等等。显然有

$$G_0(\boldsymbol{k})\ |_V\subset G_0(\boldsymbol{k})\ |_S \tag{44.17}$$

对于G_k也有同样的关系，为了确定，以下只写$G_0(\boldsymbol{k})$。在S中任取波矢$\boldsymbol{k}_0$，在V中取$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_0+d\boldsymbol{k}$. 设$\boldsymbol{k}_0$点上的一组$D^{(\nu)}$不可约基为$\{\psi^{(\nu)}_{\boldsymbol{k}_0,i}\}$，假定这组基已经按$G_0(\boldsymbol{k}_0)$的子群$G_0(\boldsymbol{k})$约化，可写为$\{\psi^{(\nu,\mu)}_{\boldsymbol{k}_0,l}\}$，其中$\mu$是$G_0(\boldsymbol{k})$的不可约表示$K^{(\mu)}$的标记，$l$是$K^{(\mu)}$的列标。令

$$\varphi^{(\mu)}_{\boldsymbol{k},l}(\boldsymbol{r})=e^{-id\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi^{(\nu,\mu)}_{\boldsymbol{k}_0,l}(\boldsymbol{r}) \tag{44.18}$$

则有（证明同(44.8)和(44.9)）

$$(\varepsilon\ |\boldsymbol{n})\varphi^{(\mu)}_{\boldsymbol{k},l}=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}}\varphi^{(\mu)}_{\boldsymbol{k},l} \tag{44.19}$$

$$\hat{g}\varphi^{(\mu)}_{\boldsymbol{k},l}=\sum_{l'}K^{(\mu)}_{l'l}(g)\varphi^{(\mu)}_{\boldsymbol{k},l'},\quad g\in G_0(\boldsymbol{k}) \tag{44.20}$$

以上二式表明，$\varphi^{(\mu)}_{\boldsymbol{k},l}(\boldsymbol{r})$是$\boldsymbol{k}$点上的$K^{(\mu)}$不可约基，且有

$$\varphi^{(\mu)}_{\boldsymbol{k},l}(\boldsymbol{r})\xrightarrow[k\to k_0]{}\psi^{(\nu,\mu)}_{\boldsymbol{k}_0,l}(\boldsymbol{r}) \tag{44.21}$$

由此推断：与这两组基相应的能量本征值满足

$$E^{(k,\mu)}\xrightarrow[k\to k_0]{}E^{(k_0,\nu)} \tag{44.22}$$

这一结果表明，当$\boldsymbol{k}$由布里渊区的一个部分V过渡到与之

相邻的另一个部分S时，将有V内的某一个（或几个）连续函数$E^{(k,\mu)}$连续地过渡为S内的一个取定的连续函数$E^{(k,\nu)}$。由此可知，由布里渊区的一个指定部分(如布里渊区的中心点)内的每个能级$E^{(k,\nu)}$出发，按上述方式进行连续延拓，便可得出一个在整个布里渊区上连续的能量函数

$$E_n(\boldsymbol{k}), \ \boldsymbol{k} \in 布里渊区 \tag{44.23}$$

它是由布里渊区各个部分内的连续函数$E^{(k,\nu)}$连接成的。函数$E_n(\boldsymbol{k})$便是晶体中电子的能带，下标n用以区分不同的能带。

由(44.21)和(44.22)可知，能够彼此连接而形成一个能带的两个相邻的函数$E^{(k,\mu)}$和$E^{(k,\nu)}$需要满足一定的条件。即：$G_0(\boldsymbol{k})\,|_S$的表示$D^{(\nu)}$作为子群$G_0(\boldsymbol{k})\,|_V$的表示，含有不可约成分$K^{(\mu)}$。在能带理论中，这个条件称为相容性条件。我们看到，部分V和S内的能态之间的相容性条件，是由分支律

$$G_0(\boldsymbol{k})\,|_S \longrightarrow G_0(\boldsymbol{k})\,|_V \tag{44.24}$$

确定的。由于$G_0(\boldsymbol{k})$都是晶体点群（G_0的子群），分支律(44.24)是容易作出的。

在以上的讨论中，我们只使用了$B^{(k,\nu)}$的不可约基(44.7)中的一部分，即其中的n_ν个基矢$\psi^{(\nu)}_{k,i\,1}=\psi^{(\nu)}_{k,i}$ $((\alpha_1|\boldsymbol{v}(\alpha_1))=(\varepsilon|0))$，$i=1,2,\cdots,n_\nu$。上节中已指出，由$(\alpha_i|\boldsymbol{v}(\alpha_j))$作用于$\psi^{(\nu)}_{k,i}$所生成的另外$n_\nu$个基矢$(j\neq1)\psi^{(\nu)}_{k,i\,j}$ $(i=1,2,\cdots,n_\nu)$，在波矢群$G(\alpha_j\boldsymbol{k})$下按表示$A^{(\alpha_j k,\nu)}$变换，因而它们是$\alpha_j\boldsymbol{k}$点上的$D^{(\nu)}$不可约基，属于能级$E^{(\alpha_j k,\nu)}$；另一方面，已知它们属于$B^{(k,\nu)}$，因而属于能级$E^{(k,\nu)}$，于是有

$$E^{(\alpha_j k,\nu)}=E^{(k,\nu)}, \ j=1,2,\cdots,q \tag{44.25}$$

注意群G_0的任意元α总可写为

$$\alpha=\alpha_j\gamma, \ \gamma\in G_0(\boldsymbol{k}) \tag{44.26}$$

(24.25)又可扩充为

$$E^{(\alpha k,\nu)}=E^{(k,\nu)}, \ \alpha\in G_0 \tag{44.27}$$

由此推知，有

$$E_n(\alpha \boldsymbol{k})=E_n(\boldsymbol{k}),\ \alpha \in G_0 \tag{44.28}$$

这表明，能带作为布里渊区上的波矢的函数，具有晶体点群 G_0 的对称性。因此，要确定能带的函数值，只需给出它在一个基本区及其边界上的值。因为整个布里渊区恰好由一个基本区经 G_0 的全部元作用而生成。

44.3 自由电子的能带和对称化波函数

为了更好地理解上述的一般概念，我们考虑一种可以得出明显解析结果的最简单的情形，即自由电子的情形。这时完全略去了电子所处的晶体场，因而电子的波函数为平面波

$$\psi_h=e^{-i\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{44.29}$$

相应的能级为

$$E_h=\frac{\hbar^2}{2m}h^2 \tag{44.30}$$

m是电子的质量，$\boldsymbol{h}$ 是波矢。在周期性边值条件下，$h_i=m_i/V^{1/3}$，m_i是整数，V是晶体的体积；当$V\to\infty$时，$\boldsymbol{h}$ 可连续地取遍波矢空间的矢量。

这一熟知的结果显然与晶体场无关，但它可以作为真实情况的零级微扰近似解。(44.30)已经给出了零级近似的能带，为了得到“正确的”零级波函数，还需将(44.29)重新组合。如前所述，组合零级函数的工作可分两步进行，第一步是将它们按微扰算子的对称群（在此便是给定晶体的空间群）的不可约表示分类；第二步是将分类后具有同样变换性质的函数再组合，并由一级能量的本征方程确定组合系数（同时得出能量的一级修正）。因此，“正确的”零级函数是与晶体场有关的。下面将以具有简单立方点阵的晶体为例进行具体讨论。

这种晶体的布里渊区已在 41.3 节中给出，波矢空间中的任意矢量 $\boldsymbol{h}$ 必在以某一格点 $\boldsymbol{l}$ 为中心的布里渊区上，因而可写

$$\boldsymbol{h}=\boldsymbol{l}+\boldsymbol{k} \tag{44.31}$$

$\boldsymbol{k}$ 是以原点为中心的布里渊区上的波矢，$\boldsymbol{l}$ 是波矢空间的格矢（即晶体点阵的倒格矢）

$$\boldsymbol{l}=l_1\tilde{\boldsymbol{e}}_1+l_2\tilde{\boldsymbol{e}}_2+l_3\tilde{\boldsymbol{e}}_3 \tag{44.32}$$

于是(44.29)和(44.30)可写为

$$\psi_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{l}}=e^{-i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{l})\cdot\boldsymbol{r}} \tag{44.33}$$

$$E_{\boldsymbol{l}}(\boldsymbol{k})=\frac{\hbar^2}{2m}|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{l}|^2 \tag{44.34}$$

(44.33)已经具有了(44.5)的形状，相当于 $w(\boldsymbol{r})=e^{-i\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{r}}$ 的情形，是点 $\boldsymbol{k}$ 上的布洛赫函数。

假定晶体的空间群是简单的，即为 $O_h^1=P\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$，这时只需使用波矢点群 $G_0(\boldsymbol{k})$。为了将具有相同零级能量值的零级函数(44.33)按 O_h^1 的表示分类，只需将它们按 $\boldsymbol{k}$ 的波矢点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 分类，而 $\boldsymbol{k}$ 取遍基本区四面体（顶点为 Γ、R、M、X）上的点。下面只考虑线段 ΓX 上的点，对四面体上的其他点，可进行同样的分析。

为了以矢量 $\boldsymbol{l}$、$\boldsymbol{k}$、$\boldsymbol{r}$ 的分量更具体地写出(44.33)和(44.34)，需注意，简单立方点阵的格矢的基$\{\boldsymbol{e}_1，\boldsymbol{e}_2，\boldsymbol{e}_3\}$是长度为 a 的正交基；由(41.8)知，基对偶基

$$\tilde{\boldsymbol{e}}_i=\frac{2\pi}{a^2}\boldsymbol{e}_i \quad (i=1,2,3) \tag{44.35}$$

是长度为 $2\pi/a$ 的正交基；$\boldsymbol{r}$ 在$\{\boldsymbol{e}_i\}$下的分解式应为

$$\boldsymbol{r}=x\frac{\boldsymbol{e}_1}{a}+y\frac{\boldsymbol{e}_2}{a}+z\frac{\boldsymbol{e}_3}{a} \tag{44.36}$$

$\{\boldsymbol{e}_i/a\}$是具有单位长度的正交基。

先考虑ΓX的端点Γ，它是布里渊区的中心。在Γ点

$$\boldsymbol{k}=(0,\ 0,\ 0)$$

从而有

$$E_\Gamma=\frac{h^2}{2ma^2}(l_1^2+l_2^2+l_3^2) \tag{44.37}$$

$$\psi_\Gamma=e^{-2\pi i(l_1x+l_2y+l_3z)/a} \tag{44.38}$$

显然，E_Γ 的最小值和次小值以及相应的本征函数 ψ_Γ，分别由

$$\boldsymbol{l}=(0,\ 0,\ 0) \tag{44.39}$$

和

$$\boldsymbol{l}=\begin{cases}(1,0,0),\ (0,1,0),\ (0,0,1)\\(-1,0,0),\ (0,-1,0),\ (0,0,-1)\end{cases} \tag{44.40}$$

给出，即

$$E_{\Gamma 0}=0;\ \psi_{\Gamma 0}=1 \tag{44.41}$$

$$E_{\Gamma 1}=\frac{h^2}{2ma^2};\ \psi_{\Gamma 1}=e^{\pm 2\pi ix/a}, e^{\pm 2\pi iy/a}, e^{\pm 2\pi iz/a} \tag{44.42}$$

类似地可写出更高能级及其简并本征函数。

Γ 点的波矢点群为

$$G_0(\Gamma)=O_h \tag{(41.32)}$$

由(44.42)张成的 $G_0(\Gamma)$的 6 维表示空间是可约的，易算出这个表示的特征标

O_h	I	$6C_2$	$8C_3$	$6C_4$	$3C_4^2$	i	$6iC_2$	$8iC_3$	$6iC_4$	$3iC_4^2$
$\chi_{\Gamma 1}$	6	0	0	2	2	0	2	0	0	4

(44.43)

O_h 的单纯特征标的完整表已在 17.4 节中列出，对照可得

$$\chi_{\Gamma 1}(g)=\chi^{(1)}(g)+\chi^{(5)}(g)+\chi^{(8)}(g) \tag{44.44}$$

可见 $E_{\Gamma 1}$ 的本征子空间由 $G_0(\Gamma)$的特征标分别为 $\chi^{(1)}$, $\chi^{(5)}$和 $\chi^{(8)}$的三个不可约表示构成。这三个不可约表示在固体理论中的习惯记号分别为Γ_1，Γ_{12} 和Γ_{15}。利用投影算子法可将$E_{\Gamma 1}$ 的本征子空间约化，即将(44.42)中的 6 个函数重新组合成为 $G_0(\Gamma)$的不可约基。这些不可约基便是 $E_{\Gamma 1}$ 的对称化本征函

数，它们分组按 $G_0(\Gamma)$ 的不可约表示变换。

将(44.41)和(44.42)用对称化波函数写出

$$E_{\Gamma 0}:\ \psi_0^{(\Gamma_1)}=1 \quad (\Gamma_1) \tag{44.45}$$

$$E_{\Gamma 1}:\ \begin{cases} \psi^{(\Gamma_1)}=\cos 2\pi\dfrac{x}{a}+\cos 2\pi\dfrac{y}{a}+\cos 2\pi\dfrac{z}{a} & (\Gamma_1) \\ \left.\begin{array}{l} \psi_1^{(\Gamma_{12})}=\cos 2\pi\dfrac{x}{a}-2\cos 2\pi\dfrac{y}{a}+\cos 2\pi\dfrac{z}{a} \\ \psi_2^{(\Gamma_{12})}=\cos 2\pi\dfrac{x}{a}-\cos 2\pi\dfrac{z}{a} \end{array}\right\} & (\Gamma_{12}) \\ \left.\begin{array}{l} \psi_1^{(\Gamma_{15})}=\sin 2\pi\dfrac{x}{a} \\ \psi_2^{(\Gamma_{15})}=\sin 2\pi\dfrac{y}{a} \\ \psi_3^{(\Gamma_{15})}=\sin 2\pi\dfrac{z}{a} \end{array}\right\} & (\Gamma_{15}) \end{cases} \tag{44.46}$$

这些函数已同时被取为 $G_0(\Gamma)$ 的子群 $G_0(\Delta)$ 的不可约基，按 $G_0(\Delta)$ 的分类是（见下面的讨论）

$$\left.\begin{array}{l} \Delta_1:\ \psi_0^{(\Gamma_1)};\ \psi^{(\Gamma_1)},\ \psi_1^{(\Gamma_{12})},\ \psi_2^{(\Gamma_{15})} \\ \Delta_2:\ \psi_2^{(\Gamma_{12})} \\ \Delta_5:\ \psi_1^{(\Gamma_{15})},\ \psi_3^{(\Gamma_{15})} \end{array}\right\} \tag{44.47}$$

所以这里取的实际上是 $G_0(\Gamma)\supset G_0(\Delta)$ 分类基。

在线段 ΓX 的内部，即点 Δ（变点），有

$$\begin{cases} \boldsymbol{k}=(0,\ k,\ 0) \\ 0<k<\dfrac{1}{2} \end{cases} \tag{44.48}$$

从而有

$$E_{\Delta}=\frac{h^2}{2ma^2}[l_1^2+(k+l_2)^2+l_3^2] \qquad (44.49)$$

$$\psi_{\Delta}=e^{-2\pi i[l_1x+(k+l_2)y+l_3z]/a} \qquad (44.50)$$

前几个能量（k的函数）及其本征函数分别由

$$\boldsymbol{l}=(0,\ 0,\ 0) \qquad (44.51)$$

$$\boldsymbol{l}=(0,\ -1,\ 0) \qquad (44.52)$$

$$\boldsymbol{l}=\begin{cases}(1,0,0),\ (0,0,1)\\(-1,0,0),\ (0,0,-1)\end{cases} \qquad (44.53)$$

$$\boldsymbol{l}=(0,\ 1,\ 0) \qquad (44.54)$$

$$\boldsymbol{l}=\begin{cases}(1,-1,0),\ (0,-1,1)\\(-1,-1,0),\ (0,-1,-1)\end{cases} \qquad (44.55)$$

给出

$$\begin{cases}E_{\Delta 0}=\dfrac{h}{2ma^2}\\ \psi_{\Delta 0}=e^{-2\pi iky/a}\end{cases} \qquad (44.56)$$

$$\begin{cases}E_{\Delta 1}=\dfrac{h^2}{2ma^2}(1-k)^2\\ \psi_{\Delta 1}=e^{-2\pi i(k-1)y/a}\end{cases} \qquad (44.57)$$

$$\begin{cases}E_{\Delta 2}=\dfrac{h^2}{2ma^2}(1+k^2)\\ \psi_{\Delta 2}=e^{-2\pi i(ky\pm x)/a},\ \ e^{-2\pi i(ky\pm z)/a}\end{cases} \qquad (44.58)$$

$$\begin{cases}E_{\Delta 3}=\dfrac{h^2}{2ma^2}(1+k)^2\\ \psi_{\Delta 3}=e^{-2\pi i(k+1)y/a}\end{cases} \qquad (44.59)$$

$$\begin{cases}E_{\Delta 4}=\dfrac{h^2}{2ma^2}[1+(1-k)^2]\\ \psi_{\Delta 4}=e^{-2\pi i[(k-1)y\pm x]/a},\ \ e^{-2\pi i[(k-1)y\pm z]/a}\end{cases} \qquad (44.60)$$

等等。

$\varDelta$ 点的波矢点群为

$$G_0(\varDelta)=C_{4v} \tag{(41.29)}$$

其 4 次轴沿 ΓX 方向。非简并的本征函数 $\psi_{\varDelta0}$、$\psi_{\varDelta1}$、$\psi_{\varDelta3}$ 显然在 C_{4v} 下不变，即按 C_{4v} 的单位表示变换。而 $E_{\varDelta2}$ 和 $E_{\varDelta4}$ 的 4 度简并的本征函数，都按 C_{4v} 的一个 4 维可约表示变换，易算出此表示的特征标

C_{4v}	I	C_4^2	$2C_4$	$2iC_2$	$2iC_{2d}$
$\chi_{\varDelta2},\chi_{\varDelta4}$	4	0	0	2	0

(44.61)

在 19.2 节中给出的 D_4 的特征标表中，令 $C_2\to iC_2$ 及 $C_{2d}\to iC_{2d}$，便得出 C_{4v} 的特征标表，对照可得

$$\chi_{\varDelta2}(g)=\chi_{\varDelta4}(g)=\chi^{(1)}(g)+\chi^{(3)}(g)+\chi^{(5)}(g) \tag{44.62}$$

C_{4v} 的以 $\chi^{(1)}$、$\chi^{(3)}$ 和 $\chi^{(5)}$ 为特征标的这三个不可约表示，在固体理论中的习惯记法分别为 $\varDelta_1$、$\varDelta_2$ 和 $\varDelta_5$.

利用投影算子法重新组合简并本征函数，可将 $E_{\varDelta2}$ 和 $E_{\varDelta4}$ 的 4 维本征子空间约化，即作出不可约基。从而可将以上各能级的对称化本征函数写为

$$E_{\varDelta0}:\ \psi_0^{(\varDelta_1)}=e^{-2\pi iky/a}\quad(\varDelta_1) \tag{44.63}$$

$$E_{\varDelta1}:\ \psi_1^{(\varDelta_1)}=e^{-2\pi i(k-1)y/a}\quad(\varDelta_1) \tag{44.64}$$

$$E_{\varDelta2}:\ \begin{cases}\psi_2^{(\varDelta_1)}=e^{-2\pi iky/a}\left(\cos 2\pi\dfrac{x}{a}+\cos 2\pi\dfrac{z}{a}\right) & (\varDelta_1)\\[2ex] \psi^{(\varDelta_2)}=e^{-2\pi iky/a}\left(\cos 2\pi\dfrac{x}{a}-\cos 2\pi\dfrac{z}{a}\right) & (\varDelta_2)\\[2ex] \left.\begin{aligned}\psi_1^{(\varDelta_5)}&=e^{-2\pi iky/a}\sin 2\pi\dfrac{x}{a}\\ \psi_2^{(\varDelta_5)}&=e^{-2\pi iky/a}\sin 2\pi\dfrac{z}{a}\end{aligned}\right\} & (\varDelta_5)\end{cases} \tag{44.65}$$

$$E_{\Delta_3}:\ \psi_3^{(\Delta_1)}=e^{-2\pi i(k+1)y/a}\quad(\Delta_1)\tag{44.66}$$

$$E_{\Delta_4}:\ \begin{cases}\psi_4^{(\Delta_1)}=e^{-2\pi i(k-1)y/a}\left(\cos 2\pi\dfrac{x}{a}+\cos 2\pi\dfrac{z}{a}\right) & (\Delta_1)\\ \psi'^{(\Delta_2)}=e^{-2\pi i(k-1)y/a}\left(\cos 2\pi\dfrac{x}{a}-\cos 2\pi\dfrac{z}{a}\right) & (\Delta_2)\\ \left.\begin{array}{l}\psi_1'^{(\Delta_5)}=e^{-2\pi i(k-1)y/a}\sin 2\pi\dfrac{x}{a}\\ \psi_2'^{(\Delta_5)}=e^{-2\pi i(k-1)y/a}\sin 2\pi\dfrac{z}{a}\end{array}\right\} & (\Delta_5)\end{cases}\tag{44.67}$$

最后考虑ΓX的右端X。在点X，

$$\boldsymbol{k}=\left(0,\ \frac{1}{2},\ 0\right)\tag{44.68}$$

有

$$E_X=\frac{h^2}{2ma^2}\left[l_1^2+\left(l_2+\frac{1}{2}\right)^2+l_3^2\right]\tag{44.69}$$

$$\psi_X=e^{-2\pi i[l_1x+(l_2+\frac{1}{2})y+l_3z]/a}\tag{44.70}$$

前两个能级及其本征函数分别由

$$\boldsymbol{l}=\begin{cases}(0,0,0)\\(0,-1,0)\end{cases}\tag{44.71}$$

和

$$\boldsymbol{l}=\begin{cases}(1,0,0),\ (-1,0,0),\ (0,0,1),\ (0,0,-1)\\(1,-1,0),\ (-1,-1,0),\ (0,-1,1),\ (0,-1,-1)\end{cases}\tag{44.72}$$

给出

$$\begin{cases} E_{X_0}=\dfrac{h^2}{8ma^2} \\ \psi_{X_0}=e^{\pm\pi i y/a} \end{cases} \tag{44.73}$$

$$\begin{cases} E_{X_1}=\dfrac{5h^2}{8ma^2} \\ \psi_{X_1}=e^{\pm\pi i(y+2x)/a},\ e^{\pm\pi i(y-2x)/a},\ e^{\pm\pi i(y+2z)/a},\ e^{\pm\pi i(y-2z)/a} \end{cases} \tag{44.74}$$

X点的波矢点群为

$$G_0(X)=D_{4h} \qquad ((41.33))$$

其4次轴沿ΓX方向，并含有子群$G_0(\Delta)=C_{4v}$. 以上两个能级的本征函数分别张成$G_0(X)$的一个2维表示空间和一个4维表示空间，易算出这两个表示的特征标

D_{4h}	I	C_4^2	$2C_4$	$2C_2$	$2C_{2d}$	i	iC_4^2	$2iC_4$	$2iC_2$	$2iC_{2d}$
χ_{X0}	2	2	2	0	0	0	0	0	2	2
χ_{X1}	8	0	0	0	0	0	0	0	4	0

(44.75)

由19.2节给出的D_4的特征标表容易写出D_{4h}的特征标表。由(19.15)可知

$$D_{4h}=D_4\times\{I,\ \sigma_h\}=D_4\times\{I,\ i\}$$

故D_{4h}的不可约表示可由D_4的不可约表示和$\{I,\ i\}$的不可约表示的直积作出。这样将由D_4的每个表示产生D_{4h}的两个表示，这两个表示可用在D_4的表示记号下加以脚标+和-来标记，分别由$\{I,\ i\}$的i对应于+1和-1的两个表示生成。于是可由D_4的单纯特征标的完整表写出D_{4h}的单纯特征标的完整表。与(44.75)对照得出

$$\chi_{X_0}=\chi_+^{(1)}+\chi_-^{(2)} \tag{44.76}$$

$$\chi_{X_1}=\chi_+^{(1)}+\chi_+^{(3)}+\chi_+^{(5)}+\chi_-^{(2)}+\chi_-^{(4)}+\chi_-^{(5)} \tag{44.77}$$

在固体理论中，出现在(44.77)中的不可约表示的习惯记法依次为：X_1，X_2，X_5，X_4'，X_3'，X_5'。将以上两个本征子空间约化，便得出对称化的本征函数

$$E_{X_0}:\begin{cases}\psi_0^{(X_1)}=\cos\pi\dfrac{y}{a} & (X_1,\ \Delta_1)\\[2ex] \psi_0^{(X_4')}=\sin\pi\dfrac{y}{a} & (X_4',\ \Delta_1)\end{cases} \tag{44.78}$$

$$E_{X_1}:\begin{cases}\psi^{(X_1)}=\cos\pi\dfrac{y}{a}\left(\cos 2\pi\dfrac{x}{a}+\cos 2\pi\dfrac{z}{a}\right) & (X_1,\ \Delta_1)\\[2ex] \psi^{(X_4')}=\sin\pi\dfrac{y}{a}\left(\cos 2\pi\dfrac{x}{a}+\cos 2\pi\dfrac{z}{a}\right) & (X_4',\ \Delta_1)\\[2ex] \psi^{(X_2)}=\cos\pi\dfrac{y}{a}\left(\cos 2\pi\dfrac{x}{a}-\cos 2\pi\dfrac{z}{a}\right) & (X_2,\ \Delta_2)\\[2ex] \psi^{(X_3')}=\sin\pi\dfrac{y}{a}\left(\cos 2\pi\dfrac{x}{a}-\cos 2\pi\dfrac{z}{a}\right) & (X_3',\ \Delta_2)\\[2ex] \left.\begin{array}{l}\psi_1^{(X_5)}=\sin\pi\dfrac{y}{a}\sin 2\pi\dfrac{x}{a}\\[2ex] \psi_2^{(X_5)}=\sin\pi\dfrac{y}{a}\sin 2\pi\dfrac{z}{a}\end{array}\right\} & (X_5,\ \Delta_5)\\[2ex] \left.\begin{array}{l}\psi_1^{(X_5')}=\cos\pi\dfrac{y}{a}\sin 2\pi\dfrac{x}{a}\\[2ex] \psi_2^{(X_5')}=\cos\pi\dfrac{y}{a}\sin 2\pi\dfrac{z}{a}\end{array}\right\} & (X_5',\ \Delta_5)\end{cases}$$

$$(44.79)$$

这些对称化波函数也是$G_0(X)$的子群$G_0(\Delta)$的不可约基，即是$G_0(X)\supset G_0(\Delta)$分类基，每个函数后面的括号内注出了其对称性。

由以上的能量公式可作出Δ轴(ΓX)上的自由电子的能带图，其中的能量单位取为$\frac{h^2}{2ma^2}$.

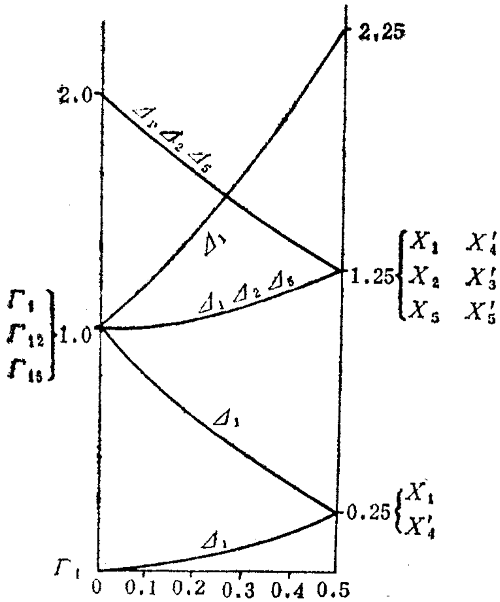


图 44.1 自由电子的能带

在自由电子的能带中，存在着不同对称类型的状态的简并，以及具有相同对称类型的能带的交点（例如，$\psi_3^{(\Delta_1)}$和$\psi_4^{(\Delta_1)}$的能带在$k=\frac{1}{4}$处相交）。需指出，这种情形的出现，是自由电子近似的结果，随着晶体场的引入，这种情形便将消

除。

在§31中已经阐明，原则上，外场只保留由其对称性（对称群）所导致的简并（偶然简并除外）。所以随着晶体场的引入，属于不同对称类型的态的能量将彼此分离。例如，能级 $E_{\Gamma 1}$ 将按对称类型 Γ_1，Γ_{12} 和 Γ_{15} 分裂为三个能级；$E_{\Delta 2}$ 将按 Δ_1，Δ_2 和 Δ_3 分裂为三条线（见图），等等。但分裂之后的能量的大小次序应由晶体场的具体特性决定，不能单由对称性推知。

如果采取近自由电子近似，则可将晶体场 $\hat{H}'$ 看作微扰，这时能级的一级修正可由正确的零级近似波函数 ψ 给出

$$\Delta E = \langle \psi | \hat{H}' | \psi \rangle \tag{44.80}$$

我们知道，为了得出正确的零级波函数，只需将具有相同对称性的对称化零级波函数再组合。因而，当具有某种对称性的对称化的零级波函数在给定的零级能量的本征函数中只出现一次时，它本身就是正确的零级波函数。由(44.44)、(44.62)、(44.76)、和(44.77)知，这个条件对本例中的所有对称化波函数都是满足的。因而，除了下面指出的几个例外的情形，对称化的零级波函数就是正确的零级波函数，并可用(44.80)计算一级能量的修正值。

例外的情形发生在 Δ 轴的内部靠近端点 $\Gamma(k=0)$ 和 $X\left(k=\frac{1}{2}\right)$，以及中点 $\left(k=\frac{1}{4}\right)$ 处。在 $k=0$ 点的（右）邻域，$E_{\Delta 1}$、$E_{\Delta 2}$ 和 $E_{\Delta 3}$ 靠得很近（交于 $k=0$ 点），因而不能对每个能级单独使用微扰论，而必须将这三个能级当作同一个能级处理。所以在 $k=0$ 的邻域内，三个 Δ_1 型的函数 $\psi_1^{(\Delta_1)}$，$\psi_2^{(\Delta_1)}$ 和 $\psi_3^{(\Delta_1)}$ 近乎属于同一零级能量，为了求得正确的零级波函数，需将它们再组合。组合系数是 $k(0<k<\delta)$ 的函数，由一个 3×3 的矩阵

$(i, j=1, 2, 3)$

$$(\langle\psi_i^{(\Delta_1)}|\hat{H}'|\psi_j^{(\Delta_1)}\rangle) \tag{44.81}$$

的本征方程确定，这个矩阵的三个本征值给出能级的一级修正值。组合出的三个新函数仍然是属于对称类型 Δ_1 的，在 $k=0$ 这个邻域的右边，它们分别逐渐过渡为原来的三个函数；在 $k=0$ 处，它们分别与函数 $\psi^{(\Gamma_1)}$, $\psi_1^{(\Gamma_{12})}$和 $\psi_{2,1}^{(\Gamma_{15})}$(见式(44.47))相连接，例如有

$$\frac{1}{2}\psi_1^{(\Delta_1)}|_{k=0}+\psi_2^{(\Delta_1)}|_{k=0}+\frac{1}{2}\psi_3^{(\Delta_1)}|_{k=0}=\psi^{(\Gamma_1)}$$

等等。对于在X点$\left(k=\frac{1}{2}\right)$的（左）邻域内发生的情形，可以进行类似的分析。

在中点$k=\frac{1}{4}$及其（左、右）邻域内，E_{Δ_2}和E_{Δ_4}靠很近$\left(相交于k=\frac{1}{4}点\right)$，因而需要将两个 Δ_1 型的函数 $\psi_3^{(\Delta_1)}$和 $\psi_4^{(\Delta_1)}$再组合，组合系数和两个修正能量值由一个类似于(44.81)的 2×2的矩阵的本征方程确定。这样一来，晶体场$\hat{H}'$将导致$k=\frac{1}{4}$点上关于 Δ_1 为二度简并的零级能量的分裂，从而原来相交的两个零级能带对于 Δ_1 将变成两个不再相交的一级能带。在固体理论中，这种现象称为能带的杂化。当我们从自由电子模型过渡到具有晶场的实际晶体时，必须注意能带性质的两个明显变化：(1)自由电子模型所特有的高简并度的分裂，(2)具有相同对称性的能带的杂化。

由于上述的能带杂化效应，在实际晶体中，具有相同对称性的能带一般是不相交的。因为，即使在自由电子的能带中存在对称性相同的能带的交点，晶体场的杂化效应也会导致交点

处的能量的分裂和态的重新组合（杂化），从而使能带分离开来。但杂化效应不存在于对称性不同的能带之间，故在实际晶体中，具有不同对称性的能带是可以相交的。

44.4 自旋与双群

在上面的讨论中我们忽略了电子自旋的效应。当考虑到电子的自旋-轨道耦合效应时，在电子的哈密顿量中将增加一个与自旋有关的附加项[参看 L.I. Schiff：量子力学(1968)或其中译版(1982)，§53]

$$\hat{H}_s=\frac{1}{2m^2c^2}\nabla V(\boldsymbol{r})\times\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}} \qquad (44.82)$$

其中$V(\boldsymbol{r})$是晶体场的势函数（前面曾以$\hat{H}'$表示），∇是梯度算子。这个附加项的存在将导致电子的对称群的变动。

在空间平移操作下，算子∇、$\hat{\boldsymbol{p}}$和$\hat{\boldsymbol{s}}$都不变，因而$\hat{H}_s$象$V(\boldsymbol{r})$那样变换。在转动操作下，∇、$\hat{\boldsymbol{p}}$和$\hat{\boldsymbol{s}}$都按$\boldsymbol{r}$的变换方式变换，因而混合矢积$\hat{H}_s$将象$V(\boldsymbol{r})$那样变换。所以，如果我们约定，转动操作不仅作用于空间变量，同时也作用于自旋变量，则晶体的空间对称操作（使$V(\boldsymbol{r})$不变）也是$\hat{H}_s$的对称操作（使$\hat{H}_s$不变）。因此，当考虑到自旋-轨道耦合效应时，只须对晶体的空间群作如下的变动：其操作的转动部分同时作用于电子的自旋变量。作此变动之后的群称为原空间群的双群。我们看到，考虑自旋-轨道耦合效应时，电子的对称群是晶体的空间群的双群。

空间群的双群与原空间群的差别仅在于其空间操作的点操作部分，二者的平移部分是相同的，所以我们只需研究空间群的点群的双群。让一个点群的操作同时作用于电子的自旋变数，所生成的群便是原点群的双群。

一个转动操作$g\in SO(3)$对自旋变量的作用，是通过矩阵$u(g)\in SU(2)$作用于电子的自旋波函数来实现的（参看22.1

节）。当g的参数取为欧拉角(φ，θ，ψ)时，有

$$u(g)=\begin{bmatrix} e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\psi)}\cos\frac{\theta}{2} & -e^{-\frac{i}{2}(\varphi-\psi)}\sin\frac{\theta}{2} \\ e^{\frac{i}{2}(\varphi-\psi)}\sin\frac{\theta}{2} & e^{\frac{i}{2}(\varphi+\psi)}\cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \qquad ((7.20))$$

当g的参数取为转动矢量$\boldsymbol{\alpha}=\alpha\boldsymbol{n}$时，有

$$u(g)=\cos\frac{\alpha}{2}I-i\sin\frac{\alpha}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} \qquad ((7.7))$$

其中I是单位矩阵，$\boldsymbol{\sigma}$的分量为泡利矩阵。由此可见，当α增加2π时$u(g)$将改变符号，所以$u(g)$是g的双值函数。实际上$u(g)$确定了$SO(3)$的双值不可约表示$D^{(\frac{1}{2})}$。这个表示可以扩充成为群$O(3)$的一个双值不可约表示，为此只需确定矩阵$u(i)$。因反演i与$SO(3)$的元可易，故$u(i)$与$u(g)$可易。按舒尔引理，必有$u(i)=\lambda I$；又由同态关系$[u(i)]^2=u(i^2)=u(e)=\pm I$推知$\lambda^2=\pm1$，$\lambda=\pm1$，$\pm i$。限于双值表示，应取$\lambda=\pm1$。从而得出

$$u(i)=\pm I \qquad (44.83)$$

(7.7)与(44.83)确定了$O(3)$群的一个双值不可约表示。空间反演操作i对自旋变数的作用，是通过矩阵$u(i)$作用于自旋波函数来实现的。

任意点群都是$O(3)$的子群，所以点群的双群是该点群的一个双值表示，其乘法结构可由(7.7)和(44.83)作出。显然，点群之双群的阶等于点群阶的2倍。

在(7.7)中，同一个转动g对应的矩阵$u(g)$的两个值，具有相反的符号，相当于参数α相差2π的情形。将这两个矩阵中的一个记为$u_1(g)$，另一个则为$-u_1(g)$。为了使$u_1(g)$具有确定的意义，我们约定：$u_1(g)$是(7.7)中的$\alpha\in[0, 2\pi)$时所

得出的$u(g)$值。对于第二类点操作ig，我们约定$u_1(ig)=u_1(g)$，特别地$u_1(i)=I$。这样对于任意点操作(第一类或第二类)g，$u_1(g)$都有了确定的意义。

双群的操作同时作用于空间坐标和自旋变数，可记作

$$u(g)g=\pm u_1(g)g \tag{44.84}$$

通常以G'表示点群G的双群，我们有

$$G'=\{u_1(g)g,\ -u_1(g)g;\ g\in G\} \tag{44.85}$$

此式也可看作是双群的定义。

习惯上常取如下简化记法

$$\begin{cases} u_1(g)g\text{——}g \\ -u_1(g)g\text{——}\bar{g} \end{cases} \tag{44.86}$$

来表示双群的元。但这时必须注意，g作为G的元和G'的元二者的含意是不同的，特别是有不同的乘法。所以G'的子集$\{g\}$对G'中的乘法一般不一定是封闭的，因而G不一定是（同构于）G'的一个子群。事实上，在G'中g的乘法取决于矩阵$u_1(g)$的乘法

$$u_1(g)u_1(h)=u_1(gh)\text{或}-u_1(gh) \tag{44.87}$$

因而如果对G的元有

$$gh=f$$

则对G'的元可能有（当(44.87)的右边取负号）

$$gh=\bar{f}$$

式(44.85)表明，G'是G的二次覆盖群。

上面我们阐明了双群的概念，现在进一步研究双群的乘法表。设点群

$$G=\{g_1=I,\ g_2,\cdots,g_N\} \tag{44.88}$$

其中I是恒等操作（G的单位元），则G的双群为

$$G'=\{I,g_2,\cdots,g_N,\bar{I},\bar{g}_2,\cdots,\bar{g}_N\} \tag{44.89}$$

(44.89)中的I是G'的单位元。由(44.87)可知在G'中有

$$\bar{g}_i = \bar{I} g_i = g_i \bar{I} \tag{44.90}$$

$$\bar{I}^2 = I \tag{44.91}$$

若在G内有乘法

$$g_i g_j = g_k \tag{44.92}$$

则在G'内有

$$g_i g_j = g_k \text{ 或 } \bar{g}_k \tag{44.93}$$

可见，G'的前N个元的乘法虽然受限于G内的乘法，但前者不能由后者推出。事实上，(44.93)的右边取g_k还是$\bar{g}_k$，是由(44.87)决定的。这是关键的一点。(44.93)对G的任意二次覆盖群都是成立的，而(44.87)则具体地确定了G'内的乘法结构，从而将G的双群G'与G的其他二次覆盖群区分开来。由(44.90)和(44.91)可知，G'的乘法表完全由其前N个元$\{I, g_1, \cdots, g_N\}$的乘法决定（这一点也是G的二次覆盖群的共性，见式(43.44)——(43.46)）

$$\begin{cases} g_i\bar{g}_j = \bar{g}_i g_j = \bar{I}(g_i g_j) = \begin{cases} \bar{I} g_k = \bar{g}_k \\ \bar{I}\bar{g}_k = g_k \end{cases} \\ \bar{g}_i\bar{g}_j = \bar{I}^2 g_i g_j = g_i g_j = \begin{cases} g_k \\ \bar{g}_k \end{cases} \end{cases} \tag{44.94}$$

因此，为了作出G'的乘法表，只需利用(44.87)和(7.7)或(7.20)计算(44.93)。

例 1 C_{3v}的双群C'_{3v}

$$C_{3v} = \{I,\ C_3,\ C_3^2,\ \sigma^{(1)},\ \sigma^{(2)},\ \sigma^{(3)}\}$$

$$C'_{3v} = \{I, C_3, C_3^2, \sigma^{(1)}, \sigma^{(2)}, \sigma^{(3)}, \bar{I}, \bar{C}_3, \bar{C}_3^2, \bar{\sigma}^{(1)}, \bar{\sigma}^{(2)}, \bar{\sigma}^{(3)}\}$$

C_{3v}的元C_3和C_3^2的转角分别为120°和240°，转轴沿z方向，有$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \sigma_3$；反映操作$\sigma^{(i)}$可写为反演$i$与绕映面的法线$\boldsymbol{n}_i$旋转180°的乘积，$\boldsymbol{n}_i$都在$xy$平面上，让$\sigma^{(3)}$的映面法线沿$x$轴，则有$\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{\sigma} = -\frac{1}{2}\sigma_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\sigma_2$，$\boldsymbol{n}_2\cdot\boldsymbol{\sigma} = -\frac{1}{2}\sigma_1 -$

$\frac{\sqrt{3}}{2}\sigma_3$，$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}=\sigma_1$。代入(7.7)得出

$$u(I)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\ u(C_3)=\begin{pmatrix}e^{-i\pi/3} & 0\\ 0 & e^{i\pi/3}\end{pmatrix},$$

$$u(C_3^2)=\begin{pmatrix}e^{-i2\pi/3} & 0\\ 0 & e^{i2\pi/3}\end{pmatrix}$$

$$u(\sigma^{(1)})=-i\begin{pmatrix}0 & e^{-i2\pi/3}\\ e^{i2\pi/3} & 0\end{pmatrix},u(\sigma^{(2)})=-i\begin{pmatrix}0 & e^{i2\pi/3}\\ e^{-i2\pi/3} & 0\end{pmatrix},$$

$$u(\sigma^{(3)})=-i\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

由此并对照点群 C_{3v} 的已知乘法表（见 2.3 节的例 1），容易对(44.93)的两种情况作出判断，从而得出双群 C'_{3v} 关于前 6 个元的部分乘法表：

C'_{3v}	I	C_3	C_3^2	$\sigma^{(1)}$	$\sigma^{(2)}$	$\sigma^{(3)}$
I	I	C_3	C_3^2	$\sigma^{(1)}$	$\sigma^{(2)}$	$\sigma^{(3)}$
C_3	C_3	C_3^2	$\bar{I}$	$\bar{\sigma}^{(3)}$	$\bar{\sigma}^{(1)}$	$\bar{\sigma}^{(2)}$
C_3^2	C_3^2	$\bar{I}$	$\bar{C}_3$	$\sigma^{(2)}$	$\sigma^{(3)}$	$\sigma^{(1)}$
$\sigma^{(1)}$	$\sigma^{(1)}$	$\bar{\sigma}^{(2)}$	$\sigma^{(3)}$	$\bar{I}$	C_3	$\bar{C}_3^2$
$\sigma^{(2)}$	$\sigma^{(2)}$	$\bar{\sigma}^{(3)}$	$\sigma^{(1)}$	$\bar{C}_3^2$	$\bar{I}$	C_3
$\sigma^{(3)}$	$\sigma^{(3)}$	$\bar{\sigma}^{(1)}$	$\sigma^{(2)}$	C_3	$\bar{C}_3^2$	$\bar{I}$

C'_{3v} 的乘法表的其余部分可由(44.94)得出。

若 G_1 是第一类点群，则直积

$$G_2=G_1\times\{I,\ i\}=G_1\times C_i \tag{44.95}$$

给出一个第二类点群。以 g 表 G_1 的元，可写

$$G_2=\{g,\ ig:\ g\in G_1\}$$

于是 G_2 的双群可写为

$$G_2'=\{u_1(g)g,\ u_1(g)ig,\ -u_1(g)g,\ -u_1(g)ig:\ g\in G_1\}$$
$$=\{u_1(g)g,\ -u_1(g)g:\ g\in G_1\}\times\{u_1(I)I,\ u_1(i)i\}$$

其中已注意到 $u_1(I)$ 和 $u_1(i)$ 都是单位矩阵，因而 $\{u_1(I)I,\ u_1(i)i\}$ 是 G_2' 的一个子群，它的元与 G_2' 的所有元可对易。这个子群显然与点群 C_i 同构。从而有

$$G_2'=G_1'\times\{u_1(I)I,\ u_1(i)i\}\cong G_1'\times C_i \qquad (44.96)$$

可见(44.95)型的第二类点群的双群结构，完全由相应的第一类点群的双群结构决定。

在 32 个晶体点群中，由 11 个第一类点群扩充出 11 个(44.95)型的第二类点群，这 11 个第二类点群的双群均可表为相应的第一类点群的双群与点群 C_i 的直积。即有

$$C_{ni}'\cong C_n'\times C_i,\ n=1,3 \qquad (44.97)$$
$$C_{nh}'\cong C_n'\times C_i,\ n=2,4,6 \qquad (44.98)$$
$$D_{3d}'\cong D_3'\times C_i \qquad (44.99)$$
$$D_{nh}'\cong D_n'\times C_i,\ n=2,4,6 \qquad (44.100)$$
$$T_h'\cong T'\times C_i \qquad (44.101)$$
$$O_h'\cong O'\times C_i \qquad (44.102)$$

对于其余 10 个第二类晶体点群的双群，可作如下的分析。首先，这 10 个第二类点群与第一类点群有下面的同构关系。

$$C_s=C_{1h}=C_{1v}=\{I,\ \sigma_h\}=\{I,\ iC_2\}=\{I\}\cup i\{C_2\}$$

可简记为

$$C_s=C_1\cup i(C_2-C_1)\cong C_2 \qquad (44.103)$$

$$C_{3h}=C_3\times\{I,\ \sigma_h\}=C_2\times\{I,\ iC_2\}$$
$$=\{I,\ C_3,\ C_3^2,\ iC_2,\ iC_2C_3,\ iC_2C_3^2\}$$
$$=\{I,\ C_6^2,\ C_6^4,\ iC_6^3,\ iC_6^5,\ iC_6\}$$
$$=\{I,\ C_6^2,\ C_6^4\}\cup i\{C_6,\ C_6^3,\ C_6^5\}$$

可简记为

$$C_{3h}=C_3\cup i(C_6-C_3)\cong C_6 \qquad (44.104)$$

同样地可得

$$D_{3h}=D_3\cup i(D_6-D_3)\cong D_6 \qquad (44.105)$$

此外还有

$$C_{nv}=C_n\cup i(D_n-C_n)\cong D_n,\ n=2,3,4,6 \qquad ((19.18))$$

$$S_4=C_2\cup i(C_4-C_2)\cong C_4 \qquad ((19.19))$$

$$D_{2d}=D_2\cup i(D_4-D_2)\cong D_4 \qquad ((19.21))$$

$$T_d=T\cup i(O-T)\cong O \qquad ((19.20))$$

又由于$u_1(i)$是单位矩阵，$u_1(ig)=u_1(g)$ ($g\in G_1$)，对于这10个第二类点群，其双群的前一半元的乘法表，与同构的第一类点群的双群的前一半元的乘法表是相同的。由此推知，这样两个双群的整个乘法表也相同，因而彼此同构。从而得到同构关系

$$C'_s\cong C'_2 \qquad (44.106)$$

$$C'_{3h}\cong C'_6 \qquad (44.107)$$

$$D'_{3h}\cong D'_6 \qquad (44.108)$$

$$C'_{nv}\cong D'_n,\ n=2,3,4,6 \qquad (44.109)$$

$$S'_4\cong C'_4 \qquad (44.110)$$

$$D_{2d}\cong D'_4 \qquad (44.111)$$

$$T_d'\cong O' \qquad (44.112)$$

以上结果表明，为了作出 32 个晶体点群的双群，只需作出 11 个第一类点群的双群，21 个第二类点群的双群可由相应的第一类点群的双群通过以上的同构关系直接写出。因此，对 32 个晶体点群的讨论，例如分类和求不可约表示等等，都可归结为对 11 个第一类点群的讨论。这是一种很有用的简化。

现在研究双群的分类问题，设G是一个第一类点群，其双群为G'. 若g和h在G'中共轭，即有s（或$\bar{s}$）$\in G'$，使$g=shs^{-1}$（或$g=\bar{s}h\bar{s}^{-1}$），则有$\bar{g}=s\bar{h}s^{-1}$（或$\bar{g}=\bar{s}\bar{h}\bar{s}^{-1}$），从

而 $\bar{g}$ 和 $\bar{h}$ 也在 G' 中共轭，反之亦然。即有

$$g \overset{G'}{\sim} h \Longleftrightarrow \bar{g} \overset{G'}{\sim} \bar{h} \qquad (44.113)$$

可见在双群中，元素的共轭关系是成对出现的。此外，若 s 为 G 中的一个旋转操中，其转动矢量为 $\boldsymbol{\alpha}_s=\alpha_s\boldsymbol{n}_s$，则 s^{-1} 的转动矢量为 $-\boldsymbol{\alpha}_s=\alpha_s(-\boldsymbol{n}_s)$，代入(7.7)或(7.8)可得 $u_1(s^{-1})=u_1(s)^{-1}$. 从而

$$u_1(s)u_1(g)u_1(s)^{-1}=u_1(s)u_1(g)u_1(s^{-1})=\pm u_1(sgs^{-1})$$

为了断定上式右端的符号，我们计算两边的迹。左边的迹为 $\mathrm{tr}u_1(g)$；设 g 的旋转矢量为 $\boldsymbol{\alpha}=\alpha\boldsymbol{n}$，则 sgs^{-1} 的旋转矢量为 $s\boldsymbol{\alpha}=\alpha(s\boldsymbol{n})$，注意到泡利矩阵的迹为零，由(7.7)得出，$u_1(g)$ 和 $u_1(sgs^{-1})$的迹都是 $2\cos\frac{\alpha}{2}$。故必有

$$u_1(s)u_1(g)u_1(s^{-1})=u_1(sgs^{-1}) \qquad (44.114)$$

由此可知，若 g 和 h 在 G 中共轭，则在 G' 中的 g 和 h 也共轭。反过来，是显然的。从而有

$$g \overset{G}{\sim} h \Longleftrightarrow g \overset{G'}{\sim} h \qquad (44.115)$$

由(44.115)和(44.113)可知，若$K=\{g\}$是G的一个共轭元素类，则在 G' 中的$K=\{g\}$和 $\bar{K}=\{\bar{g}\}$或者是G'的两个类或者合并为G'的一个类$K\cup\bar{K}$。发生后一种情形的充要条件是，对G中属于类K的任意元 g，有 $s\in G$，使

$$u_1(s)u_1(g)u_1(s^{-1})=-u_1(g)$$

或(由(44.114))

$$u_1(sgs^{-1})=-u_1(g) \qquad (44.116)$$

从而 G' 中的 g 和 $\bar{g}$ 共轭

$$g \overset{G'}{\sim} \bar{g} \qquad (44.117)$$

因此只要已知G的类，再利用判据(44.116)，便可写出双群 G' 的类。

将(7.7)代入(44.116)，并注意 sgs^{-1} 的转角等于 g 的转角 α，sgs^{-1} 的轴向为将 g 的轴向施以转动 s 后的 $s\boldsymbol{n}$，又可写出更明显的判据：

$$\begin{cases}\cos\frac{\alpha}{2}=-\cos\frac{\alpha}{2}\\ \sin\frac{\alpha}{2}s\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}=-\sin\frac{\alpha}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\end{cases}\qquad \alpha\in[0,2\pi]\quad(44.118)$$

从而得出（注意三个泡利矩阵是线性无关的）

$$\begin{cases}\alpha=\pi\\ s\boldsymbol{n}=-\boldsymbol{n}\end{cases}\qquad(44.119)$$

这个结果表明，当且仅当 G 的类 K 由转 π 角的转动组成，且对每一个这样的转动，G 中都有另一个轴向与之垂直而转角也是 π 的转动时，G' 中 K 和 $\overline{K}$ 才并为 G' 的一个类。在其他情形下，K 和 $\overline{K}$ 是 G' 的两个不同的类。据此，以及前面给出的同构关系，容易将所有晶体点群的双群的元进行分类。

例 2 双群 D_3' 和 C_{3v}' 的类

D_3 的三个类是：I，$2C_3$，$3C_2$。其中第三个类由绕三个 2 次轴的转动（转角为 π）组成，而这三个 2 次轴互不垂直。可见，对 D_3 的每个类，在 D_3' 中都有两个类。又，$C_{3v}'\cong D_3'$，同构对应由 C_3——C_3，$\sigma^{(1)}=iC_2^{(1)}$——$C_2^{(1)}$确定(见(19.18))．故有

$$D_3'=\{I,\ \bar{I},\ 2C_3,\ 2\overline{C}_3,\ 3C_2,\ 3\overline{C}_2\}$$
$$C_{3v}'=\{I,\ \bar{I},\ 2C_3,\ 2\overline{C}_3,\ 3\sigma,\ 3\bar{\sigma}\}$$

都是 6 个类。

例 3 双群 O' 和 O_h' 的类

已知点群 $O=\{I,\ 6C_2,\ 8C_3,\ 6C_4,\ 3C_4^2\}$ 有五个类，其中 $6C_2$ 和 $3C_4^2$ 两个类分别由绕 2 次轴和 4 次轴转 π 角的操作组成。O 的六个 2 次轴是成对垂直的，每对垂直于一个 4 次轴

（三个 4 次轴互相垂直）。所以与O的类 $6C_2$ 相应的，在O'中的 $6C_2$ 和 $6\overline{C}_2$ 构成一个类；对 $3C_4^2$ 也有类似的情形。从而可写出双群O'的分类（8 个类）

$$O'=\{I,\overline{I},(6C_2,6\overline{C}_2),8C_3,8\overline{C}_3,6C_4,6\overline{C}_4,(3C_4^2,3\overline{C}_4^2)\}$$

由此再利用(44.102)又可写出 O_h' 的类：前 8 个类即是O'的 8 个类；后 8 个类由O'的 8 个类乘以O_h'的元 i $(u_1(i)i;\ i\in O_h)$得出。

最后考虑求双群的不可约表示的问题。在§19 中已经给出了建立 32 个晶体点群的单纯特征标和不可约表示的具体方法，它们原则上也可以用于双群。但更为简便的办法是利用点群的已知不可约表示以及双群的一个已知的 2 维表示，来导出双群的不可约表示。

若 $A(g)$是点群G的一个不可约表示，则可由

$$\begin{cases}A'(g)=A(g)\\A'(\overline{g})=A(g)\end{cases}\tag{44.120}$$

定义双群 G' 的一个表示 A'. 显然，A' 也是不可约的；且由G的两个不等价的表示所生成的G'的表示也不等价。因而，双群G'的不可约表示总有一部分是已知的，这部分不可约表示是由点群G的不可约表示通过(44.120)生成的。为了叙述的方便，常将G'的其余的不可约表示称为附加不可约表示。为了作出双群的不可约表示的完整表，实际上只要计算双群的附加不可约表示。

在求双群的附加不可约表示时，还有一个 2 维表示 A_s' 可以利用，这便是双群作用于自旋变量的矩阵群，它显然是G'的一个同态象（见(44.85)）。A_s' 的定义可写为

$$\begin{cases}A_s'(g)=u_1(g)\\A_s'(\overline{g})=-u_1(g)\end{cases}\tag{44.121}$$

其特征标为 χ_s'，显然有

$$\begin{cases} \chi_s'(g)=2\cos\dfrac{\alpha}{2} \\ \chi_s'(\bar{g})=-2\cos\dfrac{\alpha}{2} \end{cases} \tag{44.122}$$

其中α是G'的元在G中的对应元（第一类或第二类点操作）的转角。

例 4 双群D_3'和C_{3v}'的不可约表示

点群$D_3\cong C_{3v}$的不可约表示已在19.2节中作出，其维数分别为1、1和2．将这三个表示代入(44.120)，便得到双群$D_3'\cong C_{3v}'$的前三个不可约表示$A'^{(1)}$、$A'^{(2)}$、$A'^{(3)}$，它们的特征标为

D_3'	I	$\bar{I}$	$2C_3$	$2\bar{C}_3$	$3C_2$	$3\bar{C}_2$
C_{3v}'	I	$\bar{I}$	$2C_3$	$2\bar{C}_3$	3σ	$3\bar{\sigma}$
$\chi'^{(1)}$	1	1	1	1	1	1
$\chi'^{(2)}$	1	1	1	1	−1	−1
$\chi'^{(3)}$	2	2	−1	−1	0	0

双群$D_3'\cong C_{3v}'$的类数为6，故共有六个不可约表示，因而还有三个附加表示。三个附加表示的维数n_4、n_5和n_6可由方程(16.14)确定

$$n_4^2+n_5^2+n_6^2=2\times 6-6=6$$

$$n_4=n_5=1,\ n_6=2$$

这样也就求得了完整特征标表的第一列，附加特征标的其余数值可用关于列的正交关系（17.3节之8°）求得。

设一个1维的附加特征标为$\chi'^{(4)}$，则另一个1维的附加特征标必为$\chi'^{(5)}=\chi'^{(2)}\cdot\chi'^{(4)}$。这是因为，任意两个1维表示的直积仍为一个1维表示（1维表示都是不可约的）；而且除非两个相乘的表示中有单位表示，乘积表示不会与这两个表示的

任一个等价。利用 $\chi'^{(5)}$ 与 $\chi'^{(4)}$ 的这个关系可简化计算，其中 $\chi'^{(2)}$ 是已知的，已在上面列出。

将特征标的第二类正交关系用于第二列（归一），可得

$$[\chi'^{(4)}(\bar{I})]^2+[\chi'^{(5)}(\bar{I})]^2+[\chi'^{(6)}(\bar{I})]^2$$
$$=2[\chi'^{(4)}(\bar{I})]^2+[\chi'^{(6)}(\bar{I})]^2=6$$

用于第一列与第二列（正交），又得

$$\chi'^{(4)}(\bar{I})+\chi'^{(5)}(\bar{I})+2\chi'^{(6)}(\bar{I})+6$$
$$=2\chi'^{(4)}(\bar{I})+2\chi'^{(6)}(\bar{I})+6=0$$

将以上二方程联立，解得

$$\chi'^{(4)}(\bar{I})=-1,\quad \chi'^{(6)}(\bar{I})=-2$$

类似地，可求出 $\chi'^{(4)}$ 和 $\chi'^{(6)}$ 在其余各列上的数值。从而得到三个附加单纯特征标的表

D_3'	I	$\bar{I}$	$2C_3$	$2\bar{C}_3$	$3C_2$	$3\bar{C}_2$
C_{3v}'	I	$\bar{I}$	$2C_3$	$2\bar{C}_3$	3σ	$3\bar{\sigma}$
$\chi'^{(4)}$	1	-1	-1	1	i	$-i$
$\chi'^{(5)}$	1	-1	-1	1	$-i$	i
$\chi'^{(6)}$	2	-2	1	-1	0	0

将(44.122)用于 $D_3'\cong C_{3v}'$，可得

$$\chi_s'=\chi'^{(6)}$$

由此可知，2维的附加表示 $A'^{(6)}$ 恰由 A_s' 给出

$$A'^{(6)}=A_s'$$

其中 A_s' 的6个矩阵已在例1中具体地写出，其余的6个矩阵只与前6个矩阵差一符号。这样我们已经作出了双群 $D_3'\cong C_{3v}'$ 的全部不可约表示：四个1维的，两个2维的。

例 5 双群 O' 和 O_h' 的不可约表示

点群 O 共有五个不可约表示，两个1维的，一个2维的，两个3维的，均已在19.2节中作出。将这五个表示代入

(44.120)，可得出双群O'的前五个不可约表示$A'^{(1)}$，$A'^{(2)}$，$A'^{(3)}$，$A'^{(4)}$和$A'^{(5)}$，其维数也是1，1，2，3和3。O'有八个类，故有八个不可约表示，除已得出的五个表示外，还有三个附加表示。附加表示的维数n_6，n_7，n_8满足方程(16.14)

$$n_6^2+n_7^2+n_8^2=2\times 24-24=24$$

其解为

$$n_6=n_7=2,\quad n_8=4$$

由(44.122)可算出

$$\chi_s'=(2,-2,0,1,-1,\sqrt{2},-\sqrt{2},0)$$

容易验证，χ_s'满足单纯性条件(18.4)，故表示A_s'是不可约的；又$\chi_s'\neq\chi'^{(3)}$，故A_s'与$A'^{(3)}$不等价。由此可见，A_s'是一个2维的附加表示，可取

$$A'^{(6)}=A_s'$$

另一个2维的附加表示可取为

$$A'^{(7)}=A'^{(2)}\otimes A'^{(6)}=\chi'^{(2)}\cdot A_s'$$

因$A'^{(2)}$是1维的，故$A'^{(7)}$是一个2维不可约表示。又$\chi'^{(7)}=\chi'^{(2)}\cdot\chi_s'\neq\chi_s'$，$\chi'^{(3)}$，故$A'^{(7)}$不等价于$A'^{(6)}$或$A'^{(3)}$。

最后，4维的附加表示可取为已列入下页

$$A'^{(8)}=A'^{(3)}\otimes A'^{(6)}=A'^{(3)}\otimes A_s'$$

由$\chi'^{(8)}=\chi'^{(3)}\cdot\chi_s'$可验证$A'^{(8)}$是不可约的。

至此已作出了双群O'的全部八个不可约表示。O'的单纯特征标的完整表已列于下页

因$O_h'\cong O'\times C_i$，O_h'的十六个不可约表示可由O'的八个不可约表示与C_i的两个不可约表示的所有乘积给出。

因为双群G'本身就是点群G的一个双值表示，所以G'的每个表示也是G的单值或双值表示。由(44.120)可知，由G的表示所生成的G'的表示都是G的单值表示，而且它们穷尽了G

O'	I	$\bar{I}$	$(6C_2, 6\overline{C_2})$	$8C_3$	$8\overline{C_3}$	$6C_4$	$6\overline{C_4}$	$(3C_4^2, 3\overline{C}_4^2)$
$\chi'^{(1)}$	1	1	1	1	1	1	1	1
$\chi'^{(2)}$	1	1	−1	1	1	−1	−1	1
$\chi'^{(3)}$	2	2	0	−1	−1	0	0	2
$\chi'^{(4)}$	3	3	−1	0	0	1	1	−1
$\chi'^{(5)}$	3	3	1	0	0	−1	−1	−1
$\chi'^{(6)}$	2	−2	0	1	−1	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
$\chi'^{(7)}$	2	−2	0	1	−1	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
$\chi'^{(8)}$	4	−4	0	−1	1	0	0	0

的全部单值不可约表示。由此可知，G的其他不可约表示都不会是单值的，因而G'的所有附加表示都是G的双值表示。

如果不引入双群的概念，而将点群作为基础群，我们看到，当考虑电子的自旋时，就不能仅仅使用点群的单值表示，而必须同时使用点群的双值表示。但对点群来说，处理其双值表示是很不方便的。所以通常在处理与自旋有关的问题时，宁可使用双群的概念，而避免使用双值表示。

习　题

第一章

1.1 作出下列几何图形的对称群：

(1) 正三棱柱；(2)正四面体；(3)平面上的正方点阵。

1.2 作出下列物理体系的对称群（包括空间对称和置换对称）；

(1) 锂原子中的电子；(2)氢分子中的电子；

(3) 处于均匀电场中的氢原子的电子；

(4) 处于均匀磁场中的氢原子的电子。

1.3 对由（1.4）式所定义的算子 $\hat{g}$ 证明：

(1) $\hat{g}$ 是线性的；(2)$\hat{g}$ 是幺正的；

(3) 由操作 g_1g_2 导出的算子为 $\hat{g}_1\hat{g}_2$。

1.4 试推导出（1.7）式和（1.9）式。

1.5 试证明共点点操作的运算性质（2.19)式——(2.27）式。

1.6 指出下列分子的点群；

(1) H_2O；

(2) BCl_3：三个 Cl 原子位于等边三角形的顶点，B 原子位于三角形的中心；

(3) UO_2F_5：五个 F 原子位于正五边形的顶点，U 位于五边形的中心，两个 O 位于五边形的两侧，其连线通过 U 且被五边形垂直平分；

(4) $(C_5H_5)_2Fe$：每个（C_5H_5）形成一个正五边形，每个顶点被一个 CH 占，两个五边形是一个双向正五角锥的两

底，F_e 位于锥的顶点。

1.7 证明具有高级、中级和低级点群的分子，其转动惯量椭球分别为球、回转椭球和非回转椭球。

1.8 在第二类点群中，哪些含有反演操作 i，从而可写为

$$G=G_1\cup iG_1。$$

1.9 用矩阵形式明显写出点群 C_{3v} 和 $D_{\infty h}$ 的操作。

1.10 作出各个晶体点群的对称元素系，并用图形表示。

1.11 作出属于晶类 C_{6h} 的空间群。

1.12 导出二维空间中的所有点群。

1.13 证明平面晶体点群共有十个。

1.14 在适当的坐标系中写出 14 种布喇菲格子的基矢，并用图示。

1.15 试以旋转矢量 $\boldsymbol{\alpha}$ 的转角 α 及转轴的方向角（θ，φ）为参数，写出转动操作的矩阵。

1.16 证明 $g\in SO(3)$ 与 $u\in SU(2)$ 具有关系：

$$g(\boldsymbol{\alpha})\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{r}\cdot u(\boldsymbol{\alpha})\boldsymbol{\sigma}u(\boldsymbol{\alpha})^{-1}$$

1.17 证明由上题中的关系式联系的矩阵 g 和 u，由下显式相互确定：

$$g_{ij}=\frac{1}{2}\mathrm{tr}(\sigma_i u\sigma_j u^+)$$

$$u=\pm(1+\sum_{ij}g_{ij}\sigma_i\sigma_j)/2(1+\mathrm{tr}g)^{\frac{1}{2}}$$

1.18 令 $u=\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ -\beta^* & \alpha^*\end{pmatrix}$，试以（$\alpha$，$\beta$）写出矩阵 g。

1.19 试用习题 1.15 中的参数作出 $SU(2)$ 的矩阵 u。

1.20 在习题 1.15 中的参数下，作出 $SO(3)$ 与 $SU(2)$ 的不变体积元。

1.21 设 $X=(x,y,z,ct)=(x_1,x_2,x_3,x_4)$，用下式定

义一个 4 维时空中的变换 A：

$$AX\cdot\sigma = X\cdot v\sigma v^{+}$$

其中 $\sigma=(\boldsymbol{\sigma},\sigma_4)=(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3,\sigma_4),\sigma_4=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$，$X\cdot\sigma=\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\sigma}+x_4\sigma_4=\sum_{\alpha=1}^{4}x_\alpha\sigma_\alpha$，$v\in SL(2)$。试证明：

$$A_{\alpha\beta}=\frac{1}{2}\mathrm{tr}(\sigma_\alpha v\sigma_\beta v^{+})$$

1.22 证明上题中所定义的时空变换 A 具有以下性质；

(1) $A_{\alpha\beta}$ 为实数，$\alpha,\beta=1,2,3,4$;

(2) 相对于原点的时空间隔

$$\det(X\cdot\sigma)=x_4^2-x_1^2-x_2^2-x_3^2$$

在变换 A 下不变；

(3) $\det A=1$（提示：A 是 v 的连续函数，而由 (2) 知 $\det A=\pm1$）;

(4) $A_{44}>0$.

可见，A 是正常洛仑兹变换。

1.23 证明在给定置换的对换分解式中，所含对换的个数与分解方式有关，但其偶奇性是确定不变的。试举一例。

1.24 证明任意 n 次置换能够用 $(n-1)$ 个特定的对换 $\{(1\ 2),(1\ 3),\cdots,(1\ n)\}$ 或 $\{(1\ 2),(2\ 3),\cdots,(n-1\ n)\}$ 的某种乘积来表示。

1.25 证明下列置换的集合对于置换的乘法成群：

(1) 所有 n 次置换的集合；

(2) 所有 n 次偶置换的集合；

(3) 使一给定的 n 元函数 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 保持不变的 n 次置换的集合。

1.26 证明公式 (5.8)。

1.27 S_6中有多少种循环结构，每种循环结构含有多少个置换？

1.28 设两个 4 次置换

$$a=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\4&3&2&1\end{pmatrix} \text{ 和 } b=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&1&4&2\end{pmatrix}$$

(1) 将a和b用 (1 2)、(1 3) 和 (1 4) 的乘积表示，并指出这两个置换的偶奇性；

(2) 计算 a^n 和 b^n，$n=2,3,4,\cdots$；

(3) 计算 ab，ba，a^{-1} 和 b^{-1}。

1.29 求 S_4 中使多项式 $f(x_1,x_2,x_3,x_4)$ 不变的子群：

(1) $f=x_1x_2+x_3+x_4$；　　(2) $f=x_1x_2+x_3x_4$

第二章

2.1 证明对 8.1 小节所给出的群的定义的 3°、4° 两条可作如下简化：

3° G中有"右单位元"e，使得对G中的任意元a，有

$$ae=a$$

4° G中的每个元a在G中都有"右逆元"，a^{-1}，使得

$$aa^{-1}=e$$

2.2 证明单位元和逆元的唯一性。

2.3 给出 8.1 节中例 3、例 4 和例 5 的证明。

2.4 试作出阶数 ≤6 的所有抽象群。

2.5 证明每个元的阶都是 2（单位元除外）的群必是阿贝尔群。

2.6 证明群G的子集M成为子群的充要条件是：若g，$h\in M$，则 $gh^{-1}\in M$。

2.7 证明有限群G的子集M成为子群的充要条件是：若$g,h\in M$，则 $gh\in M$。当G为无限群时，此命题是否正确？

2.8 证明质数阶的有限群必为循环群。

2.9 作出点群 O_h 的生成元。

2.10 证明群中属于同一类的所有元都有相同的阶。试举一反例证明此命题的逆不真。

2.11 设K为群的一个类，K'表K中元素的逆元的集合。证明K'也是一个类（称为类K的逆类）。

2.12 证明置换群的每个类K都是自逆的，即有 $K=K'$。

2.13 试将 32 个晶体点群写成分类的形式。

2.14 $SU(2)$ 的子集$\{u(\alpha)：0\leqslant\alpha<2\pi\}$是否是子群？试证明 $SU(2)$ 的类由 α 相同的所有 $u(\alpha)$组成。

2.15 证明阶数为母群阶数之半的子群必为不变子群。由此证明 9.4 小节的例 1 、例 2 、例 3 。

2.16 设 $G=G_1\times G_2$，证明G的所有类由 G_1 和 G_2 的类的所有乘积形成。

2.17 证明置换群 S_3、S_4 以及交换群 A_4 与点群的下列同构关系：

(1) $S_3\cong D_3$；　　(2) $S_4\cong O$；　　(3) $A_4\cong T$。

2.18 设 $G=G_1\times G_2$，证明：

(1) 商群 G/G_1 与 G_2 同构；(2) G与 G_1和 G_2 都同态。

2.19 作出由点群 C_{4v} 到二阶群 $\{1,-1\}$ 的同态映射，并证明只存在三种不同的映射方式。

2.20 设G为由元 a 生成的 12 阶的循环群，N是由元 a^3 生成的G的子群。作出商群 G/N及其乘法表。

2.21 证明连续群的连通性和紧致性在群参数的连续且双方单值的变换下都不变。

2.22 证明典型群 $O(n)$、$SO(n)$、$U(n)$、$SU(n)$ 都是紧致的。

2.23 证明任意 n 阶的有限群 G_n 同构于置换群 S_n 的一个子群。

2.24 证明 $SO(2)\cong U(1)$.

2.25 证明 $U(n)=U(1)\times SU(n)$.

2.26 在平面上的反演操作等同于绕反演中心旋转 π 角的操作，而在三维空间中则无此种情况。试推广到高维空间证明：n 维实空间中的反演等于一个正常转动的充要条件是 n 为偶数。

2.27 证明连续群 $GL(n)$、$SL(n)$、$U(n)$、$SU(n)$ 和 $SO(n)$ 的（实）维数分别为 $2n^2$、$2(n^2-1)$、n^2、n^2-1 和 $n(n-1)/2$.

2.28 设 (x,y) 为平面上点的坐标，试作出使下列二次型或双线性型不变的平面上的线性变换（矩阵）群，再将其参数化并写出在所取参数下的乘法函数：

(1) 二次型 x^2-y^2；　(2) 双线性型 $x_1y_2-y_1x_2$.

第三章

3.1 若 A 是群 G 的一个矩阵表示，求证：

(1) A^* 也是 G 的一个表示；

(2) A^{-1} 和 A^+ 不是 G 的表示，除非 G 是阿贝尔群；

(3) $A(g^{-1})$ 和 $[A(g^{-1})]^+$ 是 G 的表示。

3.2 若式（12.1）中的矩阵 $A(g)$ 是幺正的，试通过直接运算证明：$A_{12}(g)=0$，从而 $A(g)$ 是直可约的。

3.3 试证表示 $A(g)$、$A(g)^*$、$\widetilde{A(g^{-1})}$ 和 $A(g^{-1})^+$ 同时为可约或不可约的。

3.4 证明群 G 的表示 $\hat{A}(g)$ 不可约的充要条件为：对于表示空间中的任意非零矢量 ψ_0，矢量集 $\{\hat{A}(g)\psi_0: g\in G\}$ 张成整个表示空间。

3.5 证明舒尔引理的逆：若与表示 $A(g)$ 的所有矩阵可对易的矩阵都是单位矩阵的倍数，则 $A(g)$ 是不可约的。

3.6 证明矩阵的直积运算具有性质（13.3）—(13.8)。

3.7 证明在一维表示中，不可能有零值出现。

3.8 证明：群G的表示

$$\begin{cases} A\sim A' \\ B\sim B' \end{cases} \Rightarrow A\oplus B\sim A'\oplus B'$$

3.9 证明群G的任意不可约表示与任意一维表示的乘积仍是G的一个不可约表示。

3.10 设 $\{u_1, u_2, \cdots, u_n\}$ 和 $\{v_1, v_2, \cdots, v_n\}$ 是某一空间中按群G的同一不可约矩阵表示 $A(g)$ 变换的两组矢量，试证明：这两组矢量或者线性独立或者有 $u_i = cv_i$，$i=1,2,\cdots,n$，c 是与 i 无关的常数。

3.11 设$\mathscr{V}$为群G的表示空间，$\mathscr{W}_1$和$\mathscr{W}_2$是$\mathscr{V}$的两个不可约（对G）子空间，试证明：$\mathscr{W}_1$和$\mathscr{W}_2$或者线性无关（无非零公共矢量）或者完全重合。

3.12 利用上题的结论证明：不等价的不可约子空间是线性无关的。

3.13 证明阿贝尔群的所有不可约表示都是一维的。

3.14 设 $G=\{\cdots, a^{-2}, a^{-1}, e, a, a^2, \cdots\}$ 是一无限阿贝尔群，$A(a^m)=\begin{pmatrix} 1 & m \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$是$G$的一个可约表示。试证明完全可约性定理不适用于$G$。

第四章

4.1 试证每一个有限群至少有一个忠实表示。

4.2 设G为具有不变和的群，$A(g)$ 为G的一个 n 维不可约表示，证明 n^2 个矩阵元$\{A_{ij}(g)$：$i,j=1,2,\cdots,n\}$作为G上的函数是线性无关的。

4.3 利用上题的结论证明：按G的不可约表示变换的矢量组，或者是线性无关的，或者全为零。

4.4 利用 4.2 题的结论证明：若 $A(g)$ 为N阶有限群G

的n维不可约表示，则任意$n\times n$的矩阵都能表为N个矩阵$\{A(g):\ g\in G\}$的线性组合。

4.5 设$A(g)$是有限群G的一个不可约矩阵表示，K是G中的一个共轭类，证明$\sum\limits_{g\in K}A(g)$是单位矩阵的倍数。

4.6 试用特征标理论对有限群重新证明13.3节的一般结论：不可约表示的直积$A(g)\otimes B(g)$中含有单位表示的充要条件，是B等价于A的对偶表示，而且只能含单位表示1次。

4.7 设G为N阶的有限群，$\chi(g)$是G的一个特征标，证明$a_n=N^{-1}\sum\limits_{g\in G}[\chi(g)]^n$对$n=1,2,\cdots$都是非负整数。

4.8 试证，有限群G的两个表示不含公共的不可约成分，当且仅当它们的特征标正交。

4.9 作出点群C_{4v}的类代数，算出其结构常数。

4.10 连续点群$O(2)$是具有不变和的群，试作如下讨论：

(1) 写出群上不变和的具体形式;

(2) 将群元分为共轭类;

(3) 写出单纯特征标的完整表;

(4) 直接证明单纯特征标的两种正交性和完备性;

(5) 利用特征标重新计算直积表示的约化公式(15.43)。

4.11 作出下列点群的单纯特征标的完整表：

(1) C_{4v};　(2) D_{4h};　(3) D_{5d};　(4) $D_{\infty h}$。

4.12 作出下列分支律：

(1) $O_h\longrightarrow C_{4v}$;　(2) $D_{4h}\longrightarrow C_{4v}$。

4.13 作出点群O的C——G级数。

4.14 试将第二类点群与第一类点群的同构关系(19.18)——(19.22)推广到非晶体点群。

4.15 设$A(s)$为置换群S_3的二维不可约表示(15.18),

试用投影子法将直积表示 $A(s)\otimes A(s)$ 的四维表示空间约化，写出由直积基到耦合基的变换矩阵。

4.16　孤立原子 d 轨道的非归一化波函数去掉一个与 r 有关的因子后可写为$\{yz, zx, xy, x^2-y^2,\ 2z^2-x^2-y^2\}$。

(1) 直接证明以上五个简并波函数张成群 D_{4h} 的一个表示空间，并计算此表示的特征标；

(2) 用投影算子法作出这个空间的 D_{4h} 不可约基和约化的 S 矩阵；

(3) 讨论原子 d 轨道的能级在具有 D_{4h} 对称性的微扰场中的分裂，并写出一级修正能量的计算公式。

第五章

5.1　证明 $SO(3)$ 的自然表示等价于不可约表示 $D^{(1)}$；作出由自然表示（直角坐标系下的矩阵）到 $D^{(1)}$ 的标准矩阵的变换。

5.2　证明 $SU(2)$ 的不可约表示$D^{(J)}$ 有性质：$D^{(J)}(-u)=(-1)^{2J}\cdot D^{(J)}(u)$，$u\in SU(2)$。

5.3　推导出（21.43）时，曾删去了一个因子$(-1)^{M-M'}$。试证明这相当于对矩阵表示 $D^{(J)}$ 作了一个相似变换，因而新旧表示彼此等价；作出这个变换矩阵。

5.4　$SO(3)$ 的不可约表示的标准矩阵作为子群 $SO(2)$（其转轴为 z 轴）的表示是已经约化了的，具有对角形(21.25)。试作出一个相似变换 S，使

$$S^{-1}D^{(L)}S\,|_{SO(2)}=1\oplus R(\alpha)\oplus R(\alpha)^2\oplus\cdots\oplus R(\alpha)^L$$

其中 $R(\alpha)$ 是 $SO(2)$ 的自然表示的矩阵，α 为转角，

$$R(\alpha)=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha\\ \sin\alpha & \cos\alpha\end{pmatrix}$$

5.5　试作出 $SO(2)$ 的一个二维的双值实矩阵表示。

5.6　证明：$SU(2)$ $(SO(3))$的每个不可约表示都是自偶

的；有 $D^{(J)}_{M',M}(g)^*=(-1)^{M-M'}D^{(J)}_{-M',-M}(g)$；若$\{\psi^{(J)}_M\}$和$\{\varphi^{(J)}_M\}$都是 $D^{(J)}$ 的不可约基，则$\sum\limits_M(-1)^{J-M}\psi^{(J)}_M\varphi^{(J)}_{-M}$ 是不变量。

5.7 设 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 都是角动量，试证明：

(1) 若 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 对易，则 $\boldsymbol{K}=\boldsymbol{J}_1-\boldsymbol{J}_2$ 不是角动量；

(2) 若 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 满足对易关系$[\hat{J}_{1x},\hat{J}_{2x}]=0$，$[\hat{J}_{1x},\hat{J}_{2y}]=i\hbar\hat{J}_{2z}$，$[\hat{J}_{1x},\hat{J}_{2z}]=-i\hbar\hat{J}_{2y}$，以及它们对 (x,y,z) 的循环置换式，则$\boldsymbol{K}=\boldsymbol{J}_1-\boldsymbol{J}_2$ 是角动量。

5.8 证明关于角动量 $\boldsymbol{J}$ 的恒等式：$i[\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}]=\hbar\boldsymbol{\alpha}\times\boldsymbol{J}$。

5.9 试由 3-j 符号(22.46) 的对称性 1°、2° 和 3° 写出 C——G 系数的相应的对称性质，并给出后者的证明。

5.10 证明 $(lm_1lm_2|LM)=(-1)^L(lm_2lm_1|LM)$，$l$、$L$ 都是整数。据此讨论两个相同的玻色子的总自旋态的置换对称性与总自旋量子数的关系。对于两个相同费米子的情形，结果如何？

5.11 证明三电子体系的总自旋态只有一个四重态$\left(S=\dfrac{3}{2}\right)$和两个双重态$\left(S=\dfrac{1}{2}\right)$，试作出这些态的自旋波函数。

5.12 设H是 n 阶厄米矩阵，令 $U=e^{iH}$。把H扩充为m阶厄米矩阵 $H'=\begin{pmatrix}H & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$。

(1) 证明 $e^{iH'}=\begin{pmatrix}U & 0\\ 0 & I\end{pmatrix}$，$I$ 是 $(m-n)$阶的单位矩阵；

(2) 证明群$U(n)$同构于群$\left\{\begin{pmatrix}U & 0\\ 0 & I\end{pmatrix}\right\}$，常称$U(n)$是$U(m)$的一个子群 $(n<m)$；

(3) 试证，在上述意义下，$SU(n)$ 是 $SU(m)$ 的一个子群。

5.13　考虑具有如下形式的所有实矩阵的集合：

$$\begin{pmatrix} 1 & a & b \\ 0 & c & d \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ c>0$$

（1）证明它构成一个四维（实）李群，写出其乘法函数；

（2）写出其无穷小生成元和无穷小算子（利用（23.9）式）；

（3）计算(2)的对易子积。

5.14　证明下面的 $m\times m$ 矩阵空间形成李代数：

（1）所有上三角矩阵；

（2）所有迹为零的上三角矩阵；

（3）所有对角元为零的上三角矩阵。

确定与它们对应的李群。

5.15　对题5.13中的李群作出一组正则参数。

5.16　证明结构常数的性质（23.28）和（23.29）两式。

5.17　试证明关于矩阵的指数函数的下列定理：

（1）若 A 和 B 可对易，则有 $e^{A+B}=e^Ae^B$；

（2）$Be^AB^{-1}=e^{BAB^{-1}}$；

（3）若 A 的本征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$，则 e^A 的本征值为 e^{λ_1}，e^{λ_2}，$\cdots$，e^{λ_n}；

（4）$(e^A)^*=e^{A^*}$，$\widetilde{(e^A)}=e^{\tilde{A}}$，$(e^A)^+=e^{A^+}$，$(e^A)^{-1}=e^{-A}$；

（5）$\det(e^A)=e^{\mathrm{tr}A}$；

（6）若 A 是反对称的，则 e^A 是正交的；若 A 是反厄米的，则 e^A 是幺正的；

（7）$e^{-A}Be^A=B+\frac{1}{1!}[B,A]+\frac{1}{2!}[[B,A],A]+\cdots$；

（8）$e^Ae^B=e^C$，

$$C=A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A,[A,B]]-\frac{1}{12}[B,[B,A]]+\cdots。$$

5.18 试对 23.4 节中所指出的李群与其李代数的关系一一作出证明。

5.19 作出 $SU(n)$ 的李代数，证明其复扩充为 $SL(n)$ 的李代数。

5.20 作出 $SO(n)$ 的李代数，证明其复扩充为 $SO(n,C)$ 的李代数。

5.21 证明 $\left\{ I_k=\frac{1}{2i}I'_k：k=1,2,\cdots,8 \right\}$ 构成 $SU(3)$ 的生成元：

$$I'_1=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix},\qquad I'_2=\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&0\\0&0&0\end{pmatrix},$$

$$I'_3=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&0\end{pmatrix},\qquad I'_4=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&0\\1&0&0\end{pmatrix},$$

$$I'_5=\begin{pmatrix}0&0&-i\\0&0&0\\i&0&0\end{pmatrix},\qquad I'_6=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},$$

$$I'_7=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix},\qquad I'_8=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-2\end{pmatrix}.$$

计算 $SU(3)$ 的结构常数。

5.22 写出 $SU(3)$ 的无穷小算子。

5.23 平面上的欧几里得群 E_2，通过变换

$$\begin{cases}x'=\cos\theta x-\sin\theta y+a\\ y'=\sin\theta x+\cos\theta y+b\end{cases}$$

将平面上的点 (x, y) 变成点(x', y')。

（1）证明此李群与下列矩阵的群同构；

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & a \\ \sin\theta & \cos\theta & b \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

（2）在群参数（θ，a，b）下计算无穷小生成元和结构常数。

5.24　证明群 $SO(4)$ 的李代数与群 $SO(3)\times SO(3)$ 的李代数同构。

5.25　三维空间中的洛仑兹群 $SO(2, 1)$ 由使二次型 $x_1^2+x_2^2-x_3^2$ 不变且行列式为1的变换组成。

（1）求 $SO(2, 1)$ 的李代数 $so(2, 1)$；

（2）证明 $so(2, 1)$ 与 $so(3)$ 具有相同的复扩充。

5.26　设 $gl(n, C)$、$sl(n, C)$ 和 $o(n, C)$ 分别为群 $GL(n, C)$，$SL(n, C)$ 和 $O(n, C)$ 的李代数，试证明：$sl(n, C)$ 和 $o(n, C)$ 都是 $gl(n, C)$ 的子代数；而且 $sl(n, C)$ 是 $gl(n, C)$ 的理想，但 $o(n, C)$ 不是。

5.27　计算李代数 $so(2, 1)$ 和 E_2 的李代数的度规张量，用嘉当准则证明：$so(2, 1)$ 是半单的，而 E_2 的李代数是非半单的。

5.28　直接证明李代数 $so(3)$ 和 $so(2, 1)$ 都是单的。

5.29　求李代数 $so(2, 1)$ 的根与标准基。

5.30　证明：实李代数是紧的，当且仅当其基林型是负定的（见[13]、[15]）。

5.31　证明：$so(3)$ 是紧的；$so(2, 1)$ 和 E_2 的李代数是非紧的。

5.32　设半单李代数$\mathscr{L}$的规范化的标准基为 $\{H_i, E_\alpha\colon i=1, 2, \cdots, l;\ \alpha\in\Sigma\}$，作基矢变换

$$\begin{cases} H_i' = \sqrt{-1}H_i, \ i=1.2.\cdots,l \\ U_\alpha = (E_\alpha - E_{-\alpha})/2, \ \alpha \in \Sigma_+ \\ V_\alpha = \sqrt{-1}(E_\alpha + E_{-\alpha})/2, \alpha \in \Sigma_+ \end{cases}$$

新基的所有实系数的线性组合构成$\mathscr{L}$的一个实形$\mathscr{L}_u$。试证明$\mathscr{L}_u$的基林型是负定的，从而$\mathscr{L}_u$是紧的。$\mathscr{L}_u$称为$\mathscr{L}$的紧实形。

5.33 证明：$so(n,C)$的紧实形是$so(n)$；$sp(2n,C)$的紧实形是$sp(2n)$.

5.34 作出下列李代数的标准基的对易式：

(1) B_2； (2) C_2； (3) G_2。

5.35 作出各个单李代数的单纯根系。

5.36 对各个单李代数计算其单纯根的长度和夹角，并据此作出邓金图。

5.37 利用根的性质证明：任意单李代数都不会有如○═══○——○所示的邓金图。

5.38 试由G_2的邓金图出发，利用根的性质推出G_2的全部非零根。

5.39 在普通三维空间$\mathscr{R}_3$中定义李乘积$[\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}]=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{y}$（矢量外积）：

(1) 验证$[\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}]$满足李乘积应具备的三个性质，从而使$\mathscr{R}_3$成为一个三维李代数$\mathscr{L}_3$；

(2) 在常用基下写出$\mathscr{L}_3$的结构常数；

(3) 证明$\mathscr{L}_3\cong so(3)$；

(4) 作出$\mathscr{L}_3$的伴随表示的矩阵。

5.40 设ρ是由李代数$\mathscr{L}$到另一李代数的一个同态映射，$\mathscr{L}$中被ρ映为零的元的全体称为ρ的核。证明：ρ的核是$\mathscr{L}$的理想。

5.41 证明：若李代数$\mathscr{L}$为若干个子代数的直和，则其中

的每个子代数都是$\mathscr{L}$的理想。

5.42　证明半单李代数的伴随表示是忠实的（同构）。

5.43　证明每个半单李代数同构于一个矩阵李代数（线性李代数）。

5.44　证明单李代数的伴随表示是不可约的。

5.45　设$\{\hat{\rho}(v),\ v\in\mathscr{L}\}$为李代数$\mathscr{L}$的伴随表示，试证明$\mathscr{L}$的基林型可写为$(v,u)=\mathrm{tr}[\hat{\rho}(v)\hat{\rho}(u)]$。

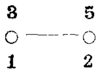
5.46　证明典型李代数A_2的外尔群为$\{I,S_\alpha,S_\beta,S_\beta S_\alpha,S_\alpha S_\beta,\ S_\alpha S_\beta S_\alpha\}$，同构于点群$C_{3v}$。

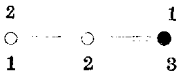
5.47　作出典型李代数B_2的外尔群。

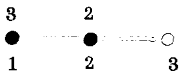
5.48　试证明25.3节的例中关于B_l、C_l和D_l的权的论断。

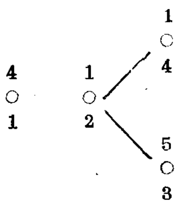
5.49　利用25.4节的定理3和习题5.36的结果，计算五个例外李代数的不可约表示的首权，要求用李代数的单纯根系来表示。

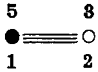
5.50　写出下列不可约表示的首权（要求用所属李代数的单纯根系表示）：

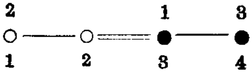
(1) 

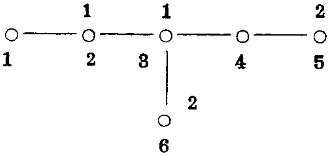
(2) 

(3) 

(4) 

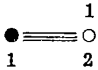
(5) 

(6) 

(7) 

5.51 写出每个单李代数的伴随表示的首权，并指出与伴随表示等价的初等表示。

5.52 利用上题的结果，

(1) 写出不可约表示 

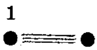
的所有权（用单纯根系表示）；

(2) 作出这个表示的矩阵（只写出 G_2 的三个基矢 H_1，E_{α_1} 和 E_{α_2} 所对应的矩阵）；

(3) 证明这个表示给出了一个与 G_2 同构的矩阵李代数。

5.53 用逐次求权法计算下列不可约表示的权的完全集：

(1) 

(2) 

试确定各个权的重数。

5.54 试将下列直积表示约化

(1) 

(2) 

(3) 

5.55 试写出 $sl(3)$ 的表示 $\overset{1}{\circ}$——$\overset{1}{\circ}$ 作为子代数 $sl(2)$ 的表示时的权。

5.56 试用上题的结果将 $SU(3)$ 的不可约表示 **8** 作为子群 $SU(2)$（在习题 5.12 的意义下）的表示加以约化。

5.57 试写出 $sl(3)$ 的规范化的标准基（$SL(3)$ 的生成元），再通过习题 5.32 中的变换作出 $su(3)$ 的基（$SU(3)$ 的生成元），并将结果与习题 5.21 中给出的 $SU(3)$ 生成元进行对比。

5.58 对习题 5.21 中给出的生成元引入实参数($\theta_1,\theta_2,\cdots\theta_8$)，可将 $SU(3)$ 的元写为；

$$T(\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_8)=e^{\sum_{k=1}^{8} I_k\theta_k}=e^{-\frac{i}{2}\sum_{k=1}^{8} I'_k\theta_k}$$

共轭类的代表元可取为：

$$T(0,0,\theta_3,0,0,0,0,\theta_8)=e^{-\frac{i}{2}(I'_3\theta_3+I'_8\theta_8)}$$

$$=e^{i(H_1\varphi_1+H_2\varphi_2+H_3\varphi_3)}$$

$$\varphi_1=-\theta_3/2-\theta_8/2\sqrt{3},\varphi_2=\theta_3/2-\theta_8/2\sqrt{3},\ \varphi_3=\theta_8/\sqrt{3}$$

试证明：

(1) $SU(3)$ 的子群 $SU(2)$（在习题 5.12 的意义下）的元为：

$$T(\theta_1,\theta_2,\theta_3,0,\cdots,0)=e^{-\frac{i}{2}\sum_{k=1}^{3} I'_k\theta_k}$$

而且 $(\theta_1,\theta_2,\theta_3)$ 即是 $SU(2)$ 的转动矢量参数 α；

(2) 当 $SU(3)$ 的元取为实矩阵时得出子群 $SO(3)$，这个 $SO(3)$ 的元为 $T(0,\theta_2,0,0,\theta_5,0,\ \theta_7,\ 0)=e^{I_2\theta_2+I_5\theta_5+I_7\theta_7}=e^{2I_7\alpha_1-2I_5\alpha_2+2I_2\alpha_3}$，而 $(\theta_2,\theta_5,\theta_7)=(2\alpha_3,-2\alpha_2,2\alpha_1)$，$(\alpha_1,$

$a_2, a_3) = \boldsymbol{\alpha}$ 是 $SO(3)$ 的转动矢量参数;

(3) $SO(3)$ 的元 $T(0,2\alpha,0,\cdots,0)=e^{2I_2\alpha}$ 属于 $SU(3)$ 的以 $T(0,0,2\alpha,0,\cdots,0)=e^{-iI_3'\alpha}=e^{-i(H_1-H_2)\alpha}$为代表元的类。

5.59 利用上题的结果，用特征标方法将 $SU(3)$ 的不可约表示 **8** 作为以下子群的表示加以约化：

(1) $SU(2)$，将结果与习题 5.56 对照;　(2) $SO(3)$.

5.60 对五个例外李代数计算其正根之和之半 δ。

5.61 对五个例外李代数推导其不可约表示维数的公式（用首权表示）。

5.62 对五个例外李代数导出其卡塞米尔算子的本征值公式（表为首权的函数）。

5.63 写出单李代数 B_2、C_2 和 G_2 的不可约表示维数公式：

(1) 用首权表示;

(2) 用数组 (k_1, k_2) 表示。

5.64 以 $SO(3)$ 表示 $SO(4)$ 的一个在习题 5.12 的意义下的子群，试作出分支律：$SO(4)\longrightarrow SO(3)$。再找出 $SO(4)$ 的另外两个与 $SO(3)$ 同构的子群，并分别作出 $SO(4)$ 对这两个子群的分支律。

第六章

6.1 对具有下列点对称性的晶体，计算其 2 阶对称张量的独立分量的个数，并用独立分量将其余分量表出：

(1) O_h;　(2) C_{3v};　(3) D_2;　(4) C_{2h}。

6.2 计算分子 $(C_5H_5)_2Fe$（见习题 1.6之(4)）的转动惯量的独立分量的个数（任意坐标系）；在惯量主轴坐标系中其分量有几个不同数值?

6.3　求出 CO_2 分子（有线型结构）的振动模式及谐振频率的简并度。

6.4　分子 SF_6 具有 O_h 对称性，试计算它的振动模式的数目，将振动模式按对称性分类，计算谐振频率的简并度。

6.5　各向同性的三维谐振子的哈密顿算子可写为

$$\hat{H}=\hbar\omega\sum_{i=1}^{3}\left(\hat{a}_i^{+}\hat{a}_i+\frac{3}{2}\right),$$

其中 $\hat{a}_i=(2m\hbar\omega)^{-1/2}\cdot(\hat{p}_i-\sqrt{-1}m\omega x_i)$，$\hat{a}_i^{+}=(2m\hbar\omega)^{-1/2}\cdot(\hat{p}_i+\sqrt{-1}m\omega x_i)$。试证：

（1）算子 $\hat{a}_i$ 和 $\hat{a}_j^{+}$ 满足对易关系

$$[\hat{a}_i,\hat{a}_j^{+}]=\delta_{ij},\ [\hat{a}_i,\hat{a}_j]=[\hat{a}_i^{+},\hat{a}_j^{+}]=0;$$

（2）$\hat{a}_i^{+}\hat{a}_i=\hat{n}_i$ 的本征值谱为非负整数，$\{\hat{a}_1^{+}\hat{a}_1,\hat{a}_2^{+}\hat{a}_2,\hat{a}_3^{+}\hat{a}_3\}$ 是一个完整力学量组（不计自旋自由度）；

（3）$\hat{a}_i$ 和 $\hat{a}_i^{+}$ 的作用分别是使 $\hat{n}_i$ 的量子数减 1 和加 1 。

（4）$\hat{H}$ 的本征值为 $E_n=\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$（$n=n_1+n_2+n_3$，$n_i=0,1,2,\cdots$），简并度是 $(n+1)(n+2)/2$。

6.6　利用上题的结果证明：

（1）九个算子 $\{\hat{a}_i^{+}\hat{a}_j:\ i,j=1.2.3\}$ 张成一个九维李代数，它与 $\hat{H}$ 可易，其基可取为以下九个厄米算子：

$$\hat{\lambda}_0=\hat{a}_1^{+}\hat{a}_1+\hat{a}_2^{+}\hat{a}_2+\hat{a}_3^{+}\hat{a}_3=\hat{n}_1+\hat{n}_2+\hat{n}_3$$

$$\hat{\lambda}_1=\hat{a}_1^{+}\hat{a}_2+\hat{a}_2^{+}\hat{a}_1,\qquad \hat{\lambda}_2=-i(\hat{a}_1^{+}\hat{a}_2-\hat{a}_2^{+}\hat{a}_1)$$

$$\hat{\lambda}_3=\hat{a}_1^{+}\hat{a}_1-\hat{a}_2^{+}\hat{a}_2,\qquad \hat{\lambda}_4=\hat{a}_1^{+}\hat{a}_3+\hat{a}_3^{+}\hat{a}_1$$

$$\hat{\lambda}_5=-i(\hat{a}_1^{+}\hat{a}_3-\hat{a}_3^{+}\hat{a}_1),\qquad \hat{\lambda}_6=\hat{a}_2^{+}\hat{a}_3+\hat{a}_3^{+}\hat{a}_2$$

$$\hat{\lambda}_7=-i(\hat{a}_2^{+}\hat{a}_3-\hat{a}_3^{+}\hat{a}_2),\qquad \hat{\lambda}_8=\frac{1}{\sqrt{3}}(\hat{a}_1^{+}\hat{a}_1+\hat{a}_2^{+}\hat{a}_2-2\hat{a}_3^{+}\hat{a}_3)$$

（2）$\{\hat{\lambda}_1,\ \hat{\lambda}_2,\cdots,\hat{\lambda}_8\}$ 与习题 5.21 中的 $\{I_1',I_2',\cdots,I_8'\}$ 满

足同样的对易关系，因而（乘以 i 后）是 $SU(3)$ 的生成元；而 $i\hat{\lambda}_0$ 是 $U(1)$ 的生成元；$\{i\hat{\lambda}_0, i\hat{\lambda}_1, \cdots, i\hat{\lambda}_8\}$ 是 $U(n)$ 的生成元；

(3) $\hat{H}$ 的本征子空间在 $\{\hat{a}_i^+\hat{a}_j; i,j=1,2,\cdots,3\}$ 下不可约，进而证明它在 $\{\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \cdots, \hat{\lambda}_8\}$ 下也不可约；

(4) $SU(3)$ 是三维谐振子的完全对称群。

6.7　证明 $SU(3)$ 的卡塞米尔算子可写为：

$$\hat{C}=\frac{1}{12}\sum_{i=1}^{8}\hat{\lambda}_i^2=\frac{1}{9}\hat{n}(\hat{n}+3),\quad \hat{n}=\hat{n}_1+\hat{n}_2+\hat{n}_3。$$

6.8　证明：二维谐振子的完全对称群为 $SU(2)$。

6.9　在下列分子按其点群分类的电子能态当中，哪些存在附加的时间反演简并：

(1) H_2O；　(2) BCl_3；　(3) UO_2F_5；

(4) $(C_5H_5)_2Fe$（以上见习题 1.6）；

(5) SF_6（见习题 6.4）。

6.10　原子中的电子体系，其空间方面的对称群是 $O(3)=SO(3)\times C_i$，试说明为什么在单电子的情形只有表示 $D^{(0,+)}$，$D^{(1,-)}$，$D^{(2,+)}$，…，才能在电子态的分类中出现，而在多电子的情形 $O(3)$ 的所有表示都能出现。

6.11　试讨论原子能级在具有下列对称性的微扰场中的分裂，并就单电子情形对前几个能级作出具体结果：

(1) D_6；　(2) D_{3d}；　(3) T_h.

6.12　证明（33.7）定义了群 G 的一个新的表示；试由此导出 G（当 G 为李群时）的李代数的一个表示。

6.13　将坐标 $\boldsymbol{r}=(\hat{x},\hat{y},\hat{z})$ 和角动量 $\hat{\boldsymbol{L}}=(\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z)$ 组合成下列点群的不可约张量算子：

(1) $D_{\infty h}$；　(2) C_{4v}；　(3) T_d；　(4) O_h.

6.14　如何由 $SO(3)$ 的两个不可约张量算子构成一个标量算子？

6.15 试将电子的电四极矩组合成点群 D_{4h} 的不可约张量算子。

6.16 求在 $D_{4h}\supset C_4$ 分类基之间的电四极跃迁的选择定则。

6.17 求在上题的分类基之间的电偶极跃迁与磁偶极跃迁的选择定则。

6.18 作出下列点群的 C——G 系数：

(1) C_{3v}; (2) C_{4v}; (3) D_{4h}.

第七章

7.1 作出 S_5 的所有不可约表示的杨台及标准盘。

7.2 写出台 $[\lambda]=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n]$的任意盘的水平置换群的阶与垂直置换群的阶。

7.3 证明 S_n 中的每一个类都只含偶置换或只含奇置换。

7.4 用两种不同的方法作出 S_4 的单纯特征标的完整表，并将结果与点群O的特征标表对照。

7.5 试计算下列置换群的不可约表示的维数：

(1) [62]; (2) [521]; (3) [422]; (4) [332];

(5) [621]; (6) [532]; (7) [441]; (8) [432].

7.6 计算上题中的各个不可约表示的特征标在由对换构成的类上的值。

7.7 试用递推公式计算下列特征标值：

(1) [422]在代表元 (12)(345)(678) 处;

(2) [432]在代表元 (12)(34)(56)(789) 处;

(3) $[53^2]$在代表元 (123)(456)(7891011) 处。

7.8 用分支律将 S_6 的表示 $[3^2]$ 按子群链 $S_6\supset S_5\supset S_4\supset S_3\supset S_2$ 约化。

7.9 作出 S_4 的各个不可约表示的标准矩阵。

7.10 作出 S_5 的各个不可约表示的标准矩阵。

7.11 写出标准基 $|(3542321211)\rangle$ 和 $|(2113123121)\rangle$ 的对偶基，试用标准盘来表示这些标准基。

7.12 当 $[\lambda]=[32]$ 时，具体写出（37.48）式和(37.49)式。

7.13 试将下列外积表示约化：

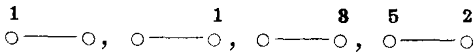
(1) $[2]\odot[2]$；　(2) $[1^2]\odot[1^2]$；　(3) $[1^3]\odot[3]$；

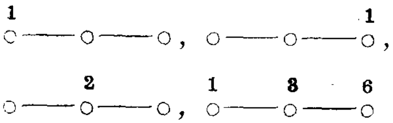
(4) $[22]\odot[21]$。

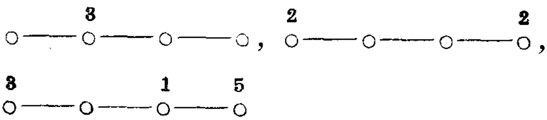
7.14 试证明：$[\lambda]\odot[\lambda']=[\lambda']\odot[\lambda]$。

7.15 在 39.2 节的例 2 中，是用 S_3 的由标准矩阵作出的投影算子将三电子自旋函数的张量积空间约化的，因而得出的 S_3 不可约基是标准基。试应用（39.50）式和杨算子重新按 $SU(2)$ 约化这个张量积空间，并将所得的不可约基与例 2 的结果对照。

7.16 分别用杨台和首权标出下列不可约表示：

(1) 

(2) 

(3) 

7.17 用公式（39.73）计算上题中的各不可约表示的维数。

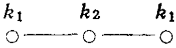
7.18 试作出习题 7.16 中的各个不可约表示的复共轭表示的杨台和角图。

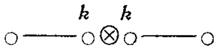
7.19 试用标记 $\{k\}=\{k_1,k_2,\cdots,k_{n-1}\}$ 写出群 $SU(n)$ 的

两个不可约幺正表示互为复共轭的充要条件。

7.20　怎样由 $SU(n)$ 的不可约表示的角图直接判断：某个表示是自偶的；某对表示是互偶的。

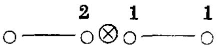
7.21　证明：

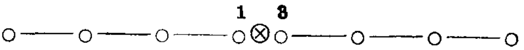
(1) $SU(4)$ 的表示  的二次直幂中包含单位表示；

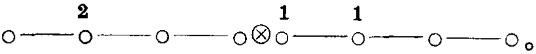
(2) $SU(3)$ 的直积表示  中包含单位表示。

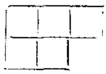
7.22　试将下列直积表示约化：

(1) ；

(2) ；

(3) ；

(4) 。

7.23　试作出下列各群的以杨台  为标记的不可约表示的角图：

(1) $SU(3)$；　(2) $SU(4)$，　(3) $SU(5)$。

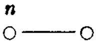
7.24　应用 $SO(3)$ 和 $SU(3)$ 的特征标公式以及习题5.58的结论，重新计算 40.3 节的例 1 中得出的 $SU(3)\longrightarrow SO(3)$ 的分支律，并增算[22]的 L 结构。

7.25　证明（参看习题 6.5 和 6.6）：

(1) 三维谐振子的总量子数为 n 的能量本征子空间所荷载的 $SU(3)$ 的不可约表示的权为：

$$\{(n_1, n_2, n_3):\ n_1+n_2+n_3=n\}$$

（提示：嘉当子代数的 $\hat{H}_1=\hat{a}_1^+\hat{a}_1$，$\hat{H}_2=\hat{a}_2^+\hat{a}_2$，$\hat{H}_3=\hat{a}_3^+\hat{a}_3$）

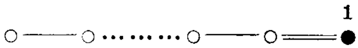
（2）上面的不可约表示为

7.26 利用上题的结果和 $SU(3)$ 的特征标公式证明：三维谐振子属于能级 E_n 的定态的角量子数为 $L=0,1,2,\cdots,n$。

7.27 在粒数表象中处理原子的 j-j 耦合的组态 j^f，$\hat{a}_m^+$ 和 $\hat{a}_m$ 分表量子数为（jm）的电子的产生算符和消灭算符。试证明：

（1）$\{\hat{H}_m=\hat{a}_m^+\hat{a}_m-\frac{1}{2}$，$\hat{a}_m^+$，$\hat{a}_m$，$\hat{a}_m^+\hat{a}_{m'}^+,\hat{a}_m^+\hat{a}_{m'},\hat{a}_m\hat{a}_{m'};m'\neq m,m,m'=-j,-j+1,\cdots,j\}$ 形成李代数 B_{2j+1} 的标准基，从而生成李群 $SO(4j+3)$；

（2）j 壳层的所有组态（$j^1,j^2,\cdots,j^{2j+1}$）所张成的 2^{2j+1} 维为空间是 $SO(4j+3)$ 的不可约表示空间，这个表示的权 $\left(\pm\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2},\cdots,\pm\frac{1}{2}\right)$，首权为 $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\cdots,\frac{1}{2}\right)$，其角图为：



7.28 证明：

（1）从上题的生成元算子的集合中去掉（$4j+2$）个算子 $\hat{a}_m^+$、$\hat{a}_m$，则其余的算子形成子代数 D_{2j+1} 的标准基，从而生成李群 $SO(4j+2)$。

（2）j 壳层的所有组态张成的空间在 $SO(4j+2)$ 下是可约的，两个不可约子空间分别由 $f=$奇数的全部组态和 $f=$偶数的全部组态张成。

（3）第一个不可约表示的首权为 $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\cdots,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right)$，第二个不可约表示的首权为 $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\cdots,\frac{1}{2}\right)$；这两个表示的角图分别为：

7.31 在习题7.29中，将 j 壳层的组态空间的简并群 $SU(2j+1)$ 的生成元取为 A_{2j} 的标准基$\{\hat{H}_m, \hat{a}_m^+\hat{a}_{m'}\}$（略去了给定的下标 j），现由标准基变到一组非标准基：

$$\hat{u}_q^{(k)} = \sum_{mm'} (-1)^{j-m'} (jmjm'|kq)\hat{a}_m^+\hat{a}_{m'}$$

$$k=0,1,2,\cdots,2j; \quad q=-k,-k+1,\cdots,k$$

试证明：

(1) $\{\hat{u}_q^{(k)}: q=-k,-k+1,\cdots,k\}$ 是 $SO(3)$ 的 $D^{(k)}$ 不可约张量算子；

(2) $\{\hat{u}_q^{(k)}: k=0,1,\cdots,2j; q=-k,-k+1,\cdots,k\}$ 满足对易关系（40.71）。

第八章

8.1 证明布里渊区的体积正比于晶体点阵的格点密度。

8.2 试写出由 D_3 的2维不可约表示所诱导出的点群O的表示。

8.3 用空间群的符号（两种）写出 $O_h^1\left(P\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}\right)$的各个波矢群。

8.4 求 O_h^3 在布里渊区的T点的不可约表示。

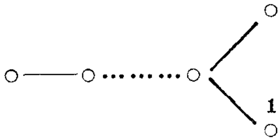
8.5 求 O_h^3 在布里渊区的R点的波矢群的单纯特征标表。

8.6 设$\psi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r})=e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}}\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$，试证明：$\psi_{\boldsymbol{k}'}$ 是$\boldsymbol{k}'$处的布洛赫函数，当且仅当 $\psi_{\boldsymbol{k}}$ 是 $\boldsymbol{k}$ 处的波洛赫函数，

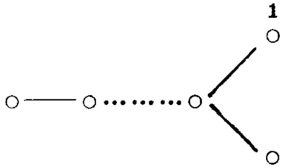
8.7 设 $g=(\alpha|\boldsymbol{t})$，$\psi_{\boldsymbol{k}}$ 为 $\boldsymbol{k}$ 点的布洛赫函数。证明 $\hat{g}\psi_{\boldsymbol{k}}$ 为 $\alpha\boldsymbol{k}$ 点的布洛赫函数。

8.8 试证明 $\boldsymbol{k}$ 点上的布洛赫函数的集合张成一个线性空间$\mathscr{V}_{\boldsymbol{k}}$，而 $\mathscr{V}_{\boldsymbol{k}}$ 在波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 下不变。

8.9 求简单立方点阵的电子能态在布里渊区上的相容性条件：



和



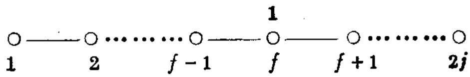
7.29 从 $SO(4j+2)$ 的生成元中再去掉 $\hat{a}_m^+\hat{a}_{m'}^+$、$\hat{a}_m\hat{a}_{m'}$ $(m\neq m',\ m,m'=-j,-j+1,\cdots,j)$，并令 $\hat{H}_m==\hat{a}_m^+\hat{a}_m-\frac{1}{2j+1}\sum_{m=-j}^{j}\hat{a}_m^+\hat{a}_m$（重新定义 $\hat{H}_m$）。试证明：

(1) $\{\hat{H}_m,\hat{a}_m^+\hat{a}_{m'};\ m'\neq m,\ m,m'=-j,-j+1,\cdots,j\}$ 形成子代数 A_{2j} 的标准基，从而生成李群 $SU(2j+1)$。

(2) j 壳层的每个组态 j^f 张成 $SU(2j+1)$ 的一个不可约表示空间，这个表示的首权为：

$$\Big(\underbrace{1-\frac{f}{2j+1},1-\frac{f}{2j+1},\cdots,1-\frac{f}{2j+1}}_{f\text{ 个}},\underbrace{-\frac{f}{2j+1},\cdots,-\frac{f}{2j+1}}_{(2j+1-f)\text{个}}\Big)$$

其角图为：



7.30 在粒子数表象中，用产生算符 $\hat{a}_{jm}^+$ 和消灭算符 $\hat{a}_{jm}$（j，m 为单粒子总角动量量子数）表出电子体系的总角动量算符 $\hat{\boldsymbol{J}}$，并利用 a 算符的基本对易式证明 $\{\hat{a}_{jm}^+;\ m=-j,-j+1,\cdots,j\}$ 是 $SO(3)$ 的 $D^{(j)}$ 不可约张量算子，即有：

$$\begin{cases}[\hat{J}_3,\hat{a}_{jm}^+]=m\hat{a}_{jm}^+\\ [\hat{J}_\pm,\hat{a}_{jm}^+]=[j(j+1)-m(m\pm1)]^{1/2}\hat{a}_{j\,m\pm1}^+\end{cases};$$

而 $\sum_{m=-j}^{j}\hat{a}_{jm}^+\hat{a}_{jm}$ 则是 $SO(3)$ 的标量算子。

(1) 从点Γ到轴Δ、Λ、Σ；

(2) 从点X到 Δ、Z、S；

(3) 从点M到Σ、Z、T。

8.10 求简单立方点阵的沿布里渊区的Λ轴的自由电子能带，作出能带图和对称性标记。

8.11 求体心立方点阵的沿布里渊区的Λ轴的自由电子能带，作出能带图和对称性标记。

8.12 什么样的点群才能成为（同构于）其双群的子群？试举出一个这样的点群。

8.13 计算下列双群的附加特征标：

(1) S_4'； (2) D_{3h}'； (3) T'.

8.14 试作出分子点群 $D_{\infty h}$的双群，计算其附加特征标。

8.15 证明空间群的操作 $(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha)+\boldsymbol{n})$ 中的非基本平移矢量 $\boldsymbol{v}(\alpha)$ 具有下列性质：

(1) $\boldsymbol{v}(\alpha\beta)=\boldsymbol{v}(\alpha)+\alpha\boldsymbol{v}(\beta)+\boldsymbol{n}$；

(2) $\boldsymbol{v}(\alpha^{-1})=-\alpha^{-1}\boldsymbol{v}(\alpha)+\boldsymbol{n}$；

(3) $\boldsymbol{v}(\alpha\beta\alpha^{-1})=\boldsymbol{v}(\alpha)-\alpha\beta\alpha^{-1}\boldsymbol{v}(\alpha)+\alpha\boldsymbol{v}(\beta)+\boldsymbol{n}$.

8.16 试用δ函数作出一个具有O_h^1对称性的点源型晶体场的势函数。

8.17 用上题中的势函数（取较简单的特殊情形）计算44.3节中的能级$E_{\Gamma 1}$的微扰分裂值。

8.18 讨论总角动量J为半奇数且具有偶宇称的原子能级在具有下列对称性的微扰场下的分裂：

(1) D_3； (2) C_{3v}； (3) O； (4) O_h。

8.19 对总角动量J为半奇数且具有奇宇称的原子能级重复上题的讨论。

8.20 证明：

(1) 若波矢点群$G_0(\boldsymbol{k})$在点群G_0中的左陪集的代表元为

$\{\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_r\}$，则$\{(\beta_1|\boldsymbol{v}(\beta_1)), (\beta_2|\boldsymbol{v}(\beta_2)), \cdots, (\beta_r|\boldsymbol{v}(\beta_r))\}$为波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 在空间群 G（其点群是 G_0）中的左陪集的代表元。

(2) 若有 $\gamma\boldsymbol{k} = -\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}$，$\boldsymbol{k}$ 为波矢空间中的倒格矢，则 $\gamma^2 \in G_0(\boldsymbol{k})$。

(3) $(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha)+\boldsymbol{n})^2 = (\varepsilon|\boldsymbol{n}+\alpha\boldsymbol{n})(\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha))^2$.

(4) 对给定的波矢 $\boldsymbol{k}$，可将求和号 $\sum\limits_{\substack{\alpha\in G_0, \beta\in\{\beta_i\} \\ (\beta^{-1}\alpha\beta\boldsymbol{k}=-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K})}}$ 写为

$[N(G_0)/N(G_0(\boldsymbol{k}))] \cdot \sum\limits_{\substack{\gamma\in G_0 \\ (\gamma\boldsymbol{k}=-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K})}}$，其中$\{\beta_i\}$表$\{\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_r\}$，假定被求和的项只与 $(\beta^{-1}\alpha\beta)$ 有关。

8.21 利用公式（42.14）、（43.101）和上题结果证明，空间群的单纯特征标 $\chi^{(\boldsymbol{k},\nu)}$ 的 Wigner 和为：

$$\sum_{g\in G}\chi^{(\boldsymbol{k}\nu)}(g^2) = [N(G)/N(G_0(\boldsymbol{k}))] \cdot \sum_{\substack{\gamma\in G_0 \\ (\gamma\boldsymbol{k}=-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K})}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot[\boldsymbol{v}(\gamma)+\gamma\boldsymbol{v}(\gamma)]} \cdot \chi^{(\nu)}(g^{(0)}_{\gamma^2})$$

其中 $\boldsymbol{v}(\gamma)$ 是空间操作 $(\gamma|\boldsymbol{t})$ 中的非基本平移矢量，$\chi^{(\nu)}$ 是 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的覆盖群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的单纯特征标，$g^{(0)}_{\gamma^2}$ 是 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的元（见 43.3 节）。

8.22 利用上题的结果作出相应的判据，讨论晶体能带的时间反演简并性。

[General Information]
书名=物理学中的群论方法　（下册）
作者=白铭复编著
页数=509
SS号=11180005
DX号=
出版日期=1986年12月第1版
出版社=国防科技大学出版社

封面
书名
版权
前言
目录
目录